



HAL
open science

Modélisation et simulation numérique d'un écoulement diphase de la balistique intérieure

Julien Nussbaum

► **To cite this version:**

Julien Nussbaum. Modélisation et simulation numérique d'un écoulement diphase de la balistique intérieure. Modélisation et simulation. Université Louis Pasteur - Strasbourg I, 2007. Français. NNT: . tel-00190008v3

HAL Id: tel-00190008

<https://theses.hal.science/tel-00190008v3>

Submitted on 14 Jan 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

INSTITUT DE RECHERCHE MATHÉMATIQUE AVANCÉE
Université Louis Pasteur et CNRS (UMR 7501)
7, rue René Descartes
67084 Strasbourg Cedex

THÈSE

présentée par

Julien NUSSBAUM

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Louis Pasteur de Strasbourg

Discipline : Mathématiques Appliquées

Modélisation et simulation numérique d'un écoulement diphasique de la balistique intérieure

soutenue le 27 novembre 2007 devant le jury composé de

Alain CARRIÈRE	Maître de recherche à l'ISL de Saint-Louis	Invité
Roxan CAYZAC	HDR Université d'Orléans,	Examineur
Sergey GAVRILYUK	Professeur à l'IUSTI de Marseille	Rapporteur externe
Edwige GODLEWSKI	Maître de Conférence à l'Université de Jussieu	Rapporteur externe
Philippe HELLUY	Professeur à l'ULP de Strasbourg	Co-Directeur de thèse
Jean-Marc HÉRARD	Ingénieur Senior à EDF de Chatou	Co-Directeur de thèse
Éric SONNENDRÜCKER	Professeur à l'ULP de Strasbourg	Rapporteur interne

Thèse financée par l'Institut franco-allemand de recherches de Saint Louis.

Table des matières

Introduction	1
1 Travaux préliminaires	7
1.1 Internal ballistic problem	9
1.2 The mathematical model	10
1.3 Constitutive laws	13
1.4 Numerical method	15
1.5 Numerical results	17
1.5.1 Academic validation	17
1.5.2 Virtual 132 mm gun	19
1.5.3 Real 60 mm gun	20
1.6 Conclusion	20
1.A Data set for AGARD 132 mm	21
1.B Hyperbolicity domain of the model	22
2 Allumage et combustion	25
2.1 Modélisation de l'échauffement	27
2.1.1 Algorithme par différences finies	29
2.1.2 Approximation polynomiale sur le profil	30
2.1.3 Comparaison des méthodes	33
2.2 Vers un nouveau critère d'allumage	37
2.2.1 Description	38
2.2.2 Calcul du profil exponentiel	40
2.2.3 Premières validations	42
2.2.4 Conclusions	45
2.3 Combustion à basse pression	45
2.3.1 Équations des phases	46
2.3.2 Conditions aux limites	48
2.3.3 Bilans à l'interface	48
2.3.4 Développements du modèle	49
2.3.5 Résultats et commentaires	53
2.4 Limites et approfondissements possibles	58

3	Aspects numériques	63
3.1	Rappel du modèle mathématique	65
3.2	Méthode des volumes finis	70
3.3	Schéma numérique	72
3.4	Méthode à pas fractionnaires	74
3.4.1	Premier pas	75
3.4.2	Deuxième pas	78
3.4.3	Troisième pas	80
3.4.4	Conclusion	81
3.5	Conditions aux limites	81
3.5.1	Condition de type paroi	82
3.5.2	Condition de type symétrie par rotation	82
3.5.3	Condition de type paroi mobile	83
3.5.4	Condition de type entrée de fluide	84
3.6	Tests numériques	86
3.6.1	Tests monophasiques à section constante	87
3.6.2	Tests monophasiques à variation de section discontinue	90
3.6.3	Test à variation de section continue et à paroi mobile	94
3.6.4	Tests diphasiques	99
3.7	Conclusion	108
4	Modèle de relaxation	111
4.1	Notations and model	113
4.2	Entropy dissipation	115
4.3	Hyperbolicity	117
4.3.1	Relaxed system	117
4.3.2	Equilibrium system	117
4.4	Relaxation algorithm	121
4.5	Remarks on the granular stress	125
4.5.1	Admissible granular stress	125
4.5.2	Associated entropy	126
4.6	Numerical results	127
4.6.1	Academical test cases	127
4.6.2	Simplified combustion chamber	128
5	Simulations de problèmes de balistique intérieure	143
5.1	Canon virtuel AGARD 132mm	146
5.1.1	Allumage parfait	148
5.1.2	Simulation de l'allumeur	149
5.2	Canon réel 40mm	158
5.2.1	Allumage parfait	159
5.2.2	Allumage simulé	160
5.3	Simulateur d'allumage	162
5.4	Conclusion	163

Conclusions et perspectives	169
Bibliographie	173
A Description du maillage	181
A.1 Maillage	181
A.2 Construction	182
A.3 Connectivité du maillage	184
B Cas tests monophasiques complémentaires	187
B.1 Tube à choc	187
B.2 Double détente	190
B.3 Double choc symétrique	190
C Solution analytique des équations d'Euler à section variable	201
D Données des canons 132 mm et 40 mm	205
D.1 Données du canon AGARD 132 mm	206
D.2 Données du canon 40 mm	207
E Communication AIAA	209
E.1 Description of the problem	209
E.2 The mathematical model	211
E.3 Moving mesh	213
E.4 Boundary conditions	214
E.5 Constitutive laws	216
E.6 Hyperbolicity of the convective part	216
E.6.1 First step	217
E.6.2 Second step	218
E.6.3 Third step	219
E.7 Numerical method	219
E.8 Validation test cases	220
E.8.1 First Riemann problem	221
E.8.2 Second Riemann problem	221
E.8.3 Driven piston test case	222
E.8.4 AGARD problem	223
E.8.5 40mm gun firing	226
E.9 Conclusions	227
F Communication ICDERS	229
F.1 Ignition in interior ballistic problem	229
F.2 Unsteady powder heating	230
F.3 Ignition criteria	231
F.4 Introduction of chemical kinetic in the gas phase	232
F.5 First tests	232

F.6 Intermediate conclusion and perspectives	235
--	-----

Table des figures

1.1	Initial geometry in a gun	9
1.2	Porosity and density	18
1.3	Evolution of pressures	19
2.1	Schéma du problème unidimensionnel	27
2.2	Évolution de la température de surface, $\phi_e(t) = \text{constante}$	34
2.3	Simulation d'allumeur	35
2.4	Évolution de la température de surface, $\phi_e(t)$ variable	37
2.5	Températures et délais d'allumage en fonction d'un flux de chaleur extérieur constant	38
2.6	Profil de température dans le solide	42
2.7	Schéma des phases dans la configuration choisie	47
2.8	Évolution du solide au cours du temps	54
2.9	Compatibilité du modèle avec une loi de Vieille	55
2.10	Simulation d'allumage et d'extinction	57
2.11	Schéma d'un allumeur	58
2.12	Configuration du système de mesure	59
2.13	Système de détection d'allumage par fibre optique	59
2.14	Exemple de long délai d'allumage	61
3.1	Schéma simplifié d'un canon	64
3.2	Conditions aux limites	81
3.3	Exemple de discrétisation de la section	82
3.4	Configuration des ondes pour une entrée subsonique	85
3.5	Comparaison des solutions pour différents maillages	88
3.6	Solutions pour chaque méthode sur un maillage de 500 cellules	89
3.7	Solutions pour chaque méthode sur un maillage de 1000 cellules	91
3.8	Solutions du 1 ^{er} problème de Riemann.	92
3.9	Solutions du 2 nd problème de Riemann.	93
3.10	Solutions du 3 ^{eme} problème de Riemann.	95
3.11	Densité 2D et gradient (en couleurs saturées) avec réflexion aux bords.	96
3.12	Géométrie initiale pour le cas du piston	97
3.13	Profils des variables à l'intérieur du système.	98
3.14	Fraction volumique de gaz : solution numérique pour chaque méthode.	102

3.15	Tube à choc diphasique, 1000 mailles.	103
3.16	Tube à choc diphasique, 5000 mailles.	104
3.17	Tube à choc diphasique avec traînée, 5000 mailles.	106
3.18	Tube à choc diphasique avec $\Lambda(\alpha_2, \rho_2) = 0$: vitesses dans la phase gazeuse.	107
3.19	Tube à choc diphasique avec $\Lambda(\alpha_2, \rho_2) \neq 0$: vitesses dans la phase gazeuse.	107
4.1	Void fraction, 50 cells, no granular stress	133
4.2	Velocities u_1 and u_2 , 50 cells, no granular stress	133
4.3	Pressures, 50 cells, no granular stress	134
4.4	Void fraction, 1000 cells, no granular stress	134
4.5	Velocities u_1 and u_2 , 1000 cells, no granular stress	135
4.6	Pressures, 1000 cells, no granular stress	135
4.7	Void fraction, 10000 cells, no granular stress	136
4.8	Velocities u_1 and u_2 , 10000 cells, no granular stress	136
4.9	Pressures, 10000 cells, no granular stress	137
4.10	Void fraction, 100,000 cells, no granular stress	137
4.11	Void fraction, 10000 cells, with granular stress	138
4.12	Velocities u_1 and u_2 , 10000 cells, with granular stress	138
4.13	Pressures, 10000 cells, with granular stress	139
4.14	Pressure evolution at the breech and the shot base during time. Comparison between the Gough and the relaxation model.	139
4.15	Porosity at the final time. Relaxation model with granular stress.	140
4.16	Velocities at the final time. Relaxation model with granular stress.	140
4.17	Pressures at the final time. Relaxation model with granular stress.	141
4.18	Density of the solid phase at the final time. Relaxation model with granular stress.	141
5.1	Mesure de la pression en un même point pour trois allumeurs différents. Évo- lution au cours du temps.	145
5.2	Évolution de la pression au culot et à la culasse pour 2 maillages 1D différents. Allumage parfait.	148
5.3	Évolution de la pression au culot et à la culasse pour des maillages de dimension 500×1 et 500×10 . Allumage parfait.	149
5.4	Évolution de la pression au culot et à la culasse dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 1. Maillage 1D de 2000 mailles.	150
5.5	Évolution de la différence de pression entre la culasse et le culot dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 1. Simulations 1D.	151
5.6	Évolution de la pression au culot dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 1. Comparaison des simulations 1D et 2D.	151
5.7	Évolution de la pression à la culasse dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 1. Comparaison des simulations 1D et 2D.	152
5.8	Évolution de la différence de pression entre la culasse et le culot dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 1. Simulations 2D.	152

5.9	Évolution de la pression au culot et à la culasse dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 2. Maillage 1D de 2000 mailles.	153
5.10	Évolution de la différence de pression entre la culasse et le culot dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 2. Simulations 1D.	154
5.11	Évolution de la pression au culot dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 2. Comparaison des simulations 1D et 2D.	154
5.12	Évolution de la pression à la culasse dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 2. Comparaison des simulations 1D et 2D.	155
5.13	Évolution de la différence de pression entre la culasse et le culot dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 2. Simulations 2D.	155
5.14	Évolution du front de flamme dans le lit de poudre. Tracé de la température de surface des grains au cours du temps. Le domaine de calcul correspond à la chambre de combustion avec un maillage de 100×20	158
5.15	Déplacement du gaz dans le lit de poudre. Tracé du vecteur vitesse. Le domaine de calcul correspond à la chambre de combustion avec un maillage de 100×20	158
5.16	Simulateur d'allumage. Maillage tridimensionnel de la chambre de combustion.	162
5.17	Évolution du front de flamme dans le lit de poudre en 3 dimensions d'espace. Tracé de la température de surface des grains au cours du temps.	166
5.18	Évolution de la contrainte intergranulaire en 3 dimensions d'espace.	167
A.1	Exemple de maille.	182
A.2	Différents maillages suivant la dimension	182
A.3	Exemple de face	183
A.4	Description de la connectivité	185
B.1	Tube à choc : $\rho_L = \rho_R = 1 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = u_R = 0 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = 4 \text{ Pa}$, $p_R = 2 \text{ Pa}$, $t_{\text{final}} = 0.05 \text{ s}$	188
B.2	Tube à choc Sod : $\rho_L = 1 \text{ kg.m}^{-3}$, $\rho_R = 0.125 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = u_R = 0 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = 1 \text{ Pa}$, $p_R = 0.1 \text{ Pa}$, $t_{\text{final}} = 0.1 \text{ s}$	189
B.3	Tube à choc : $\rho_L = \rho_R = 1 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = u_R = 0 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = 8 \text{ Pa}$, $p_R = 0.5 \text{ Pa}$, $t_{\text{final}} = 0.06 \text{ s}$	191
B.4	Tube à choc : $\rho_L = \rho_R = 1 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = u_R = 0 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = 8 \text{ Pa}$, $p_R = 0.5 \text{ Pa}$, 3000 mailles, $t_{\text{final}} = 0.06 \text{ s}$	192
B.5	Tube à choc : $\rho_L = \rho_R = 1 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = u_R = 0 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = 8 \text{ Pa}$, $p_R = 0.5 \text{ Pa}$, 6000 mailles, $t_{\text{final}} = 0.06 \text{ s}$	193
B.6	Double détente : $\rho_L = \rho_R = 10 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = -u_R = -5 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = p_R = 20 \text{ Pa}$	194
B.7	Double détente : $\rho_L = \rho_R = 10 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = -u_R = -5 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = p_R = 20 \text{ Pa}$, $t_{\text{final}} = 0.05 \text{ s}$	195
B.8	Double détente : $\rho_L = \rho_R = 10 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = -u_R = -5 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = p_R = 20 \text{ Pa}$, 4000 mailles, $t_{\text{final}} = 0.05 \text{ s}$	196
B.9	Double choc symétrique : $\rho_L = \rho_R = 10 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = -u_R = 10 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = p_R = 10 \text{ Pa}$, $t_{\text{final}} = 0.09 \text{ s}$	197

B.10	Double choc symétrique : $\rho_L = \rho_R = 10 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = -u_R = 10 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = p_R = 10 \text{ Pa}$, 4000 mailles, $t_{\text{final}} = 0.09 \text{ s}$.	198
B.11	Double choc symétrique : $\rho_L = \rho_R = 10 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = -u_R = 70 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = p_R = 10 \text{ Pa}$, $t_{\text{final}} = 0.02 \text{ s}$.	199
D.1	Nomenclature de la géométrie d'un canon	205
E.1	Nomenclature of initial geometry	210
E.2	Examples of meshes	210
E.3	Boundary configuration for subsonic inlet	215
E.4	Comparison of solutions	221
E.5	Comparison of the solutions	222
E.6	Initial geometry	222
E.7	Variable profiles	223
E.8	Pressure evolutions for different meshes	225
E.9	Pressure evolutions for 1D and 2D meshes	225
E.10	Ideal pressure evolution in the igniter	227
E.11	40mm pressure evolutions for 1D/2D simulations with igniter	228
F.1	1D interface configuration	230
F.2	Introduction of chemical kinetic	232
F.3	Simulations for a constant heat flux and ambient pressure	233
F.4	Simulations with extinction of the external heat flux	234
F.5	Combustion rate in function of ambient pressure	234

Liste des tableaux

1.1	Initial conditions, constant velocity, constant pressure.	17
1.2	Result of simulations	19
1.3	Muzzle velocity datas	20
1.4	Breech pressure datas	20
1.5	Data set for AGARD 132 mm	21
2.1	Données thermodynamiques du matériau énergétique	33
2.2	Données thermodynamiques du matériau énergétique	42
2.3	Comparaison simulations/expériences	43
2.4	Comparaison du modèle approché aux expériences	44
2.5	Données du solide	56
3.1	Problème de Riemann monophasique à section constante	87
3.2	1 ^{er} problème de Riemann	92
3.3	2 nd problème de Riemann.	93
3.4	3 problème de Riemann.	94
3.5	Vitesses et temps du piston au bout de 3.6 mètres.	97
3.6	Conditions initiales pour le cas de la discontinuité de contact	99
3.7	Conditions initiales : tube à choc diphasique.	102
5.1	Résultats de simulations AGARD par d'autres codes de balistique	147
5.2	Allumage parfait pour le cas AGARD sur maillages 1D	148
5.3	Allumage parfait pour le cas AGARD sur maillages 2D	157
5.4	Allumage simulé pour le cas AGARD sur maillages 1D. L'allumeur fonctionne dans la configuration 1.	157
5.5	Allumage simulé pour le cas AGARD sur maillages 2D. L'allumeur fonctionne dans la configuration 1.	157
5.6	Allumage simulé pour le cas AGARD sur maillages 1D. L'allumeur débite en 5 points.	157
5.7	Allumage simulé pour le cas AGARD sur différents maillages 2D. L'allumeur débite en 5 points.	157
5.8	Canon 40mm : allumage parfait sur des maillages de dimension 500×1 et 500×5	159
5.9	Canon 40mm : allumage parfait avec $Q_{ex} = 5.471$ MJ/kg. Maillage de dimension 500×1	160

5.10	Canon 40mm : simulations d'allumage réel pour $Q_{ex,1} = 5.071$ MJ/kg et $Q_{ex,2} = 5.471$ MJ/kg sur un maillage de dimension 500×1 .	161
5.11	Canon 40mm : simulations d'allumage réel pour $Q_{ex,1} = 5.071$ MJ/kg et $Q_{ex,2} = 5.471$ MJ/kg sur un maillage de dimension 500×5 .	161
A.1	Tableau de connectivité	185
D.1	Détails des données pour le canon AGARD 132mm	206
D.2	Détails des données pour le canon 40mm	207
E.1	Initial condition	221
E.2	Initial condition	221
E.3	Results for each method	223
E.4	Influence of the initial pressure	224
E.5	Results for refined meshes	224
E.6	Results for 1D and 2D meshes	225
E.7	Perfect ignition with different geometry	226
F.1	Comparison simulations/experiments	233

Introduction

L'étude de la modélisation numérique des écoulements diphasiques connaît ces dernières années un essor d'intérêts [GL06], [Bra07] d'une part à cause du grand nombre d'applications industrielles possibles, d'autres part grâce à l'évolution des moyens informatiques disponibles pour réaliser les simulations.

Ce type d'écoulement est complexe à modéliser du point de vue physique. Les interactions entre les phases font intervenir divers phénomènes souvent mal connus ou mal maîtrisés. Les applications industrielles comportent notamment l'étude des moteurs à combustion (gaz-liquide), des centrales à charbon (gaz-particules) ou des réacteurs nucléaires (eau-vapeur). Suivant le cas, les modèles doivent tenir compte des forces de traînée, des réactions chimiques, du transfert de masse ou d'énergie, des interactions au sein d'une même phase (compaction d'un lit de particules dispersées par exemple)... Autant de mécanismes dont il faut tenir compte pour reproduire fidèlement le comportement de l'écoulement dans son ensemble.

Une fois les modèles physiques posés, il est également nécessaire de choisir un modèle pour caractériser chaque phase de l'écoulement. L'approche eulérienne est celle que nous avons retenue : elle consiste à décrire les phases comme des milieux continus fictifs qui peuvent cohabiter en chaque point du domaine de calcul. Les équations d'évolution des différentes grandeurs sont établies en moyennant les équations eulériennes de bilan valables à l'intérieur de chaque région purement monophasique. Cela conduit à des systèmes de convection non conservatifs et conditionnellement hyperboliques pour lesquels la résolution exacte du problème de Riemann n'est pas possible, ce qui les exclut du cadre théorique des systèmes de lois de conservation hyperboliques. Ainsi, les méthodes numériques classiques de résolution des systèmes hyperboliques de type volumes finis ne sont plus adaptées à de tels modèles. Les schémas numériques courants basés par exemple sur des solveurs de Godunov ou de Roe nécessitent de connaître soit la solution exacte du problème de Riemann unidimensionnel local, impossible à déterminer, soit au moins les valeurs propres (et vecteurs propres) analytiques de la matrice jacobienne du système d'advection, qui sont complexes dans les cas non hyperboliques. À cause des termes non conservatifs, les relations de saut dans les solutions discontinues ne sont plus définies naturellement. Il faut donc les construire, soit par des arguments physiques, soit par des méthodes mathématiques adaptées.

Les travaux présentés dans ce mémoire s'inscrivent dans ce contexte. Nous étudions la modélisation et la simulation numérique d'écoulements diphasiques réactifs gaz-poudre appliquées

à des études de balistique intérieure. Un cycle balistique se décompose en plusieurs étapes distinctes :

1. à l'instant initial, un mélange inerte de gaz et de particules de matériau énergétique (des grains de *poudre propulsive*) est placé dans une *chambre de combustion* fermée, assimilée à un cône dont la partie rétrécie est fermée par le *culot* d'un projectile représenté par une paroi mobile. Le long de l'axe de révolution de la chambre est fixé sur la face immobile du cône (la *culasse*) un capillaire d'une longueur et d'un diamètre variables perforé de plusieurs trous et contenant une petite quantité de poudre noire (matériau très énergétique), couramment appelé *allumeur* ;
2. à un instant donné, un mécanisme piézo-électrique enflamme la poudre noire, qui dégage des gaz chauds par un mécanisme de combustion ;
3. ces gaz chauds s'échappent par les événements de l'allumeur et se propagent dans la chambre de combustion à travers le lit de poudre propulsive. Les grains sont ainsi échauffés par *transfert thermique* principalement convectif ;
4. lorsque l'échauffement de la poudre propulsive est suffisant, une série de *réactions chimiques exothermiques* apparaît à la surface des grains, qui correspond à l'*allumage* de la poudre ;
5. des réactions de décomposition exothermique auto-entretenu, c'est-à-dire qui ne nécessitent plus d'apport d'énergie de l'extérieur, apparaissent, qui caractérisent la *combustion* de la charge propulsive ;
6. par transfert de masse et d'énergie de la poudre vers le gaz, la pression dans la chambre de combustion augmente. Lorsque la force de la pression sur le culot du projectile est suffisamment importante, le projectile se met en mouvement. Il y a alors détente des gaz dans le tube d'éjection du système de propulsion, et le cycle balistique prend fin lorsque le projectile sort par la *bouche du canon*.

Les phénomènes liés aux problèmes de balistique intérieure sont très complexes et peu maîtrisés. Les interactions entre le gaz et la poudre sont très fortes et dépendent de beaucoup de paramètres. On peut citer le cas de la force de traînée, dont l'intensité varie suivant la forme des grains de poudre, de la porosité (fraction volumique de gaz dans une région) ou du régime de l'écoulement (laminaire ou turbulent), ou encore le cas du transfert de masse issu de la décomposition du solide en gaz, phénomène de combustion mettant en jeu des dizaines d'espèces chimiques dans des dizaines de réactions chimiques en parallèle. L'allumage d'une poudre propulsive est également très complexe et dépend de la nature du matériau énergétique ainsi que de la nature et de l'intensité (qui peut être variable) du flux de chaleur perçu.

Des modèles empiriques ou théoriques sont développés pour modéliser chaque phénomène, mais la nature même du cycle balistique rend cette tâche très difficile. La courte durée d'un cycle, n'excédant en général pas quelques dizaines de millisecondes, et les conditions extrêmes à l'intérieur de la chambre de combustion (plusieurs milliers de bars et de degrés) rendent les possibilités de mesures très limitées. La validation des modèles théoriques est de ce fait délicate et les modèles empiriques sont en général développés par extension de modèles décrivant des phénomènes plus simples et mieux maîtrisés.

Dans les problèmes de balistique intérieure, une attention toute particulière est portée sur l'allumage et la combustion de la poudre propulsive, qui déterminent principalement le fonctionnement des canons. Jusqu'à présent, les critères d'allumage des poudres sont très sommaires et ne reproduisent que très grossièrement les délais d'allumage observés. Le critère le plus répandu considère qu'il y a allumage lorsque la température à la surface du grain atteint une certaine température déterminée expérimentalement. Or, l'expérience permettant de déterminer cette température d'allumage est totalement différente de ce qu'on rencontre dans une chambre de combustion : le grain est placé sur une surface thermiquement conductrice chauffée lentement (quelques degrés par minute), jusqu'à ce que le grain s'enflamme. La température d'allumage expérimentale correspond à la température de la plaque au moment où le grain a commencé à brûler. D'autres critères se fondent sur la température des gaz plutôt que de la surface des grains, mais ne sont pas plus réalistes. Ils ne rendent pas compte par exemple de la variation de l'intensité du flux de chaleur reçu, qui influence beaucoup le délai d'allumage. Bien évaluer les délais d'allumage permet de reproduire certains comportements dangereux du mélange gaz-poudre. Un long délai d'allumage peut entraîner la fracturation d'une partie des grains à cause d'une trop forte compaction du lit de particules par les gaz issus de l'allumeur. La fracturation des grains peut entraîner une détonation qui peut s'avérer catastrophique pour l'ensemble du système et de ses utilisateurs.

Une fois la poudre enflammée, la vitesse linéaire de combustion d'un grain, c'est-à-dire la vitesse à laquelle se décompose une certaine épaisseur d'un grain (exprimée en mètres par seconde), détermine l'évolution de la pression dans le canon. Bien évaluer les maxima de pression permet de dimensionner correctement le système et de prévoir ses performances en terme de vitesse du projectile à la bouche du canon. La loi de Vieille qui est décrite dans la suite de ce mémoire est une relation empirique exprimant le vitesse de combustion en fonction de la pression des gaz. Cette relation produit d'excellents résultats lorsque la pression est suffisamment forte, car dans ce cas le facteur principal d'influence est la pression. Mais au début de la combustion, lorsque les pressions sont relativement faibles, le mécanisme de combustion est piloté par la température des gaz en plus de la pression. Comme la loi de Vieille décrit la vitesse de combustion comme une fonction de la pression uniquement, elle ne peut pas reproduire correctement la combustion à basse pression.

Le projet de thèse présenté ici comprend deux parties, une ayant trait à la physique de l'allumage, l'autre à la modélisation numérique des écoulements gaz-poudre. Le but est d'élaborer un critère d'allumage plus réaliste qui sera intégré dans un code de simulation d'écoulements réactifs gaz-poudre sur maillage tridimensionnel développé par nos soins. La structure de ce document est la suivante. Dans le premier chapitre, nous présentons le modèle de Gough, modèle diphasique retenu car répandu dans le monde de la balistique intérieure. La physique du modèle initial reste inchangée et les équations décrivant les divers termes sources sont décrits. Nous nous focalisons sur l'étude mathématique du système d'équations aux dérivées partielles associé à ce modèle monodimensionnel à une pression non conservatif et conditionnellement hyperbolique. Nous utilisons une méthode numérique de type volumes finis et nous proposons une adaptation du schéma de Rusanov pour calculer les flux conservatifs et les termes convec-

tifs non conservatifs. Nous détaillons également les conditions d'hyperbolicité au travers de l'étude mathématique du système d'advection associé au modèle.

Le second chapitre traite de l'étude des phénomènes d'allumage et de combustion de matériaux énergétiques. Dans un premier temps, on propose un critère d'allumage fondé sur le bilan d'énergie reçue et produite à la surface d'un grain en considérant une seule réaction chimique en phase solide. Comme ce critère sera implémenté dans un code complet de mécanique des fluides, on s'attache à réduire les coûts des calculs supplémentaires intrinsèques à ce nouveau critère au travers de plusieurs approximations. En particulier, nous proposons un algorithme rapide de résolution numérique de l'équation de la chaleur. Ces études nous ont naturellement amenés à étendre le modèle d'allumage vers un modèle simplifié de combustion à basse pression en tenant compte d'une réaction chimique en phase gazeuse supplémentaire. Les résultats sont prometteurs mais une validation plus poussée doit être réalisée une fois que certaines données concernant la cinétique chimique des poudres utilisées seront connues.

Dans le troisième chapitre, on s'intéresse à l'aspect numérique de notre modèle diphasique à sept équations (cinq équations de conservation plus deux équations de transport) : la phase dispersée est supposée incompressible et on considère les équations en trois dimensions d'espace. Ce système est résolu sur des maillages particuliers pour tenir compte des différentes géométries possibles. Ce modèle fait partie de la famille des modèles à une pression car il existe une relation algébrique entre les pressions des deux phases. Les effets de la compaction du lit de poudre sont modélisés par une contrainte intergranulaire, dont on tient compte dans l'expression de la pression pour la phase dispersée. Le modèle est non conservatif et conditionnellement hyperbolique, ce qui nous oblige à employer une méthode numérique sans calcul des valeurs propres. Nous proposons tout d'abord de calculer les flux numériques conservatifs par un schéma HLL. Les vitesses d'ondes sont prises égales aux valeurs propres des équations d'Euler, les valeurs propres du système d'advection étant complexes dans les cas non hyperboliques. Le schéma non-conservatif du premier chapitre est étendu en dimension quelconque d'espace. La solution reste stable sur des maillages grossiers du fait de l'importante viscosité numérique du schéma. Pour améliorer l'algorithme, on utilise une méthode à pas fractionnaires qui consiste à décomposer le système initial conditionnellement hyperbolique en deux sous-systèmes hyperboliques. Ainsi, les valeurs propres de chaque sous-système sont réelles et leur expression analytique nous permet de calculer les flux numériques classiques lors de chaque pas fractionnaire. Enfin, les conditions aux limites nécessaires à la simulation de problèmes de balistique intérieure sont présentées. La fin du chapitre est consacrée à la validation numérique des méthodes par des cas tests monophasiques ou diphasiques, sur des maillages à section constante ou variable, discontinue ou non.

Dans le chapitre 4, nous essayons d'améliorer le modèle de Gough en considérant un modèle de relaxation à deux pressions pour les écoulements diphasiques gaz-poudre. Le modèle est constitué des équations de bilan de masse, quantité de mouvement et d'énergie pour chaque phase compressible. A ces six équations est ajoutée une équation de transport de la fraction volumique d'une des phases avec un terme source de relaxation, qui va équilibrer les pressions des phases. Nous obtenons alors un système toujours non conservatif mais in-

conditionnellement hyperbolique. De ce système à sept équations est déduit le système à six équations qui servira aux simulations. Ce nouveau modèle est résolu par une méthode à pas fractionnaires en supposant une relaxation instantanée des pressions. Nous proposons une validation du modèle sur un cas simplifié de balistique intérieure où les termes sources modélisant les interactions entre les phases sont considérés comme constants. L'utilisation de ce modèle dans les cas généraux nécessite encore quelques développements mais est prometteuse.

Nous présentons dans le dernier chapitre des simulations de problèmes complets de balistique intérieure. Les résultats numériques sont comparés à des résultats, soit d'expériences, soit d'autres codes de balistique intérieure. On cherche plus particulièrement à évaluer les pressions maximales au culot ou à la culasse ainsi que la vitesse du projectile à la bouche du canon, ces valeurs étant relativement faciles à mesurer. Les différences qui peuvent apparaître entre les différents résultats sont commentées mais la complexité du phénomène rend difficile la localisation de la source d'erreur.

À la fin de ce mémoire se trouvent plusieurs annexes. Pour pouvoir simuler des écoulements dans des géométries complexes à variations de section, notre approche consiste à résoudre les équations de bilan en trois dimensions d'espace dans des maillages tridimensionnels, et en adaptant le raffinement suivant la dimension du problème considéré. La première annexe donne une description de cette approche ainsi que la construction du maillage correspondant. L'annexe suivante présente des simulations de cas tests monophasiques qui viennent compléter la validation numérique de notre méthode, présentée au chapitre 3. La troisième annexe expose la construction d'une solution analytique aux équations d'Euler à section variable. L'annexe D contient les tableaux de données concernant les tirs que nous avons simulés pour les canons de 132 mm et 40 mm. Enfin, les annexes E et F correspondent aux communications présentées respectivement lors de la 39th AIAA Thermophysics Conference et du 21st International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems.

Chapitre 1

Travaux préliminaires

Ce chapitre correspond à une publication dans le *Journal of Flow, Turbulence and Combustion* [NHHC06]. Nous présentons les résultats des premiers travaux que nous avons effectués sur le modèle unidimensionnel de Gough [Gou79], fréquemment utilisé dans le monde de la balistique intérieure.

Le système d'équations aux dérivées partielles (SEDP) associé au modèle de Gough est composé d'équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement pour les phases gazeuse et dispersée, ainsi que d'une équation de conservation de l'énergie pour le gaz, la phase solide étant considérée comme incompressible. Pour modéliser l'échauffement puis la combustion des grains, deux équations de transport sont rajoutées, où l'enthalpie et l'épaisseur de poudre brûlée sont convectées à la vitesse de la poudre. On obtient donc un système à sept équations.

Ce modèle peut être classé dans la catégorie des modèles à une pression. Comme nous le verrons dans la suite de ce chapitre, les pressions des phases sont liées par une relation algébrique. Ces modèles sont connus pour être conditionnellement hyperboliques. Nous étudions l'hyperbolicité de ce modèle à une pression et déterminons les cas non hyperboliques. L'un des objectifs de cet article est de rappeler des résultats classiques concernant les modèles à une pression puis de les appliquer aux problèmes de balistique intérieure.

Une autre difficulté du modèle de Gough est l'interaction entre les deux phases qui se traduit par la présence de termes non conservatifs dans notre SEDP. Nous proposons tout d'abord d'utiliser un schéma de volumes finis, avec la viscosité numérique associée à Rusanov, pour le calcul des termes conservatifs. La viscosité numérique est calculée à partir de la vitesse du son dans la phase gazeuse (les valeurs propres du système complet étant généralement complexes). Les termes non conservatifs sont approchés par un schéma centré, proposé par exemple dans [HH05]. En balistique intérieure, les solutions ne présentent pas de chocs, sauf en cas de fonctionnement anormal. Par conséquent l'approximation des termes non conservatifs peut être choisie arbitrairement.

Du point de vue physique, cet article nous permet de décrire les termes sources correspondant aux transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre les phases. La complexité de ces termes sources provient de la complexité des phénomènes physiques qui se déroulent (échauffement des grains puis réaction exothermique de décomposition de la poudre en gaz).

Enfin, le traitement du déplacement de la paroi mobile (culot du projectile) est ici traité par une méthode de "rezoning", qui consiste à dilater uniformément le domaine de calcul pour suivre l'évolution de cette paroi. Cette méthode est applicable car nous ne considérons que des cas d'écoulements à section constante. Grâce à un changement de la variable spatiale, on modifie notre SEDP de départ pour obtenir un autre SEDP dans un système de coordonnées différentes. On peut alors appliquer indifféremment les mêmes méthodes numériques pour chaque SEDP.

Numerical simulations of gas-particle flows with combustion

Julien NUSSBAUM¹, Philippe HELLUY², Jean-Marc HÉRARD³ et Alain CARRIÈRE¹

ABSTRACT. This work is devoted to the numerical modelling of a reactive gas-particle flow that arises in internal ballistic. The model, proposed by Gough [Gou79], takes into account complex physical phenomena such as mass transfer, drag force or intra granular stress. A non-conservative finite volume approach adapted from [GHS04] is applied in order to simulate the model. After an academic validation test case of the scheme, the combustion propagation ignited by a cylindrical perforated primer is then simulated and compared with experiments.

1.1 Internal ballistic problem

The two-phase flows in guns are very difficult to model. Many inter phase interaction and complex phenomena occur while the powder burns and the bullet moves in the gun tube.

In order to simplify the physical geometry of a gun, we consider a cylindrical combustion chamber linked to a tube of the same constant cross section. At the initial time, the mixture of gas-powder grains is contained in the combustion chamber, limited by the breech at one end, and by the shot base at the other end. The initial geometry is illustrated on Figure 1.1.

Propellant is ignited by a hot gas stream from an igniter. The igniter is a cylinder filled with black powder, perforated by several holes. Hot combustion gases escape through the holes. The addition of energy increases the propellant grain surface temperature. The combustion occurs when the ignition temperature is reached. After ignition, the solid propellant

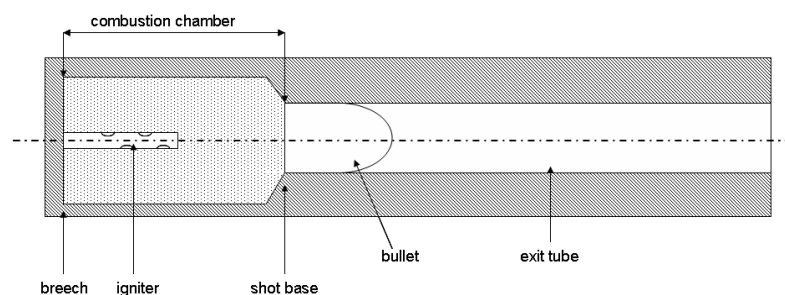


FIG. 1.1 – Initial geometry in a gun

burns and gases are produced. We assume that the combustion products are similar to the initial gas species. The pressure increases in the combustion chamber, while the front flame propagates in the powder bed according to the following mechanism : ignition of some grains

¹ISL, Saint-Louis

²IRMA-ULP, Strasbourg

³EDF, Chatou

produces a hot gas stream (as igniter does) that locally increases the temperature and pressure. The gases propagate in the domain, and by local heat transfer from the gas phase to the solid phase, the other grains are ignited.

The bullet begins to move when the pressure at the shot base is greater than the start pressure, and goes into the tube until the muzzle. Internal ballistic studies stop when the bullet exits from the tube.

Experimental studies exist but are limited : pressure measurements are only possible at the breech or at the shot base and the only available velocity is the bullet's velocity at the muzzle. The temperature and pressure gradients, the high velocities of the flow and the particles volume fractions are still difficult to measure.

1.2 The mathematical model

One can find many two-phase flow models in the scientific literature, focusing on different approaches, with different advantages and drawbacks. We refer for example to the book of Gidaspow [Gid94] for a survey of such models. We will concentrate here on the Gough's model [Gou79] that is very popular in the ballistic community. This work is devoted to find a numerical method in order to replace a Mac-Cormack integrator that is not able to simulate non-classical weapons because of numerical instabilities. For details on the evolution of ballistic models, see [Car00].

The system is made of the mass and momentum conservation laws for both phases, energy conservation for the gas phase and two convection equations for the enthalpy of the grains and the thickness of burnt powder. The flow is supposed to be one-dimensional in the direction of the symmetry axis of the gun tube with constant section.

In a first stage after ignition, the shot base does not move. In this case, the governing set of equations takes the form

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F(W)}{\partial x} + C(W) \frac{\partial W}{\partial x} = S(W) , \quad (1.1)$$

The vector $W = W(x, t) \in \Omega \subset \mathbb{R}^7$ is the unknown vector. The time variable is noted $t > 0$ and the space variable $x \in]0, L[$, where L is the length of the tube. The flux vector F and the

sources vector S are functions from Ω to \mathbb{R}^7 and C is a function from Ω to $\mathbb{R}^{7 \times 7}$. We define

$$\begin{aligned}
 W &= \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 \\ \alpha_1 E_1 \\ H_{ts} \\ d \end{pmatrix}, & F(W) &= \begin{pmatrix} \alpha_2 u_2 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_1 (\rho_1 u_1^2 + p_1) \\ \alpha_2 (\rho_2 u_2^2 + p_2) \\ \alpha_1 u_1 (E_1 + p_1) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 C(W) \frac{\partial W}{\partial x} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -p_1 \partial_x \alpha_1 \\ p_1 \partial_x \alpha_1 \\ p_1 \partial_x (\alpha_2 u_2) \\ u_2 \partial_x H_{ts} \\ u_2 \partial_x d \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{1.2}$$

where α_k is the volume fraction, ρ_k the density, u_k the velocity, p_k the pressure and E_k the total energy of phase k . The index $k = 1$ corresponds to the gas phase and $k = 2$ corresponds to the solid phase. The solid phase is supposed to be incompressible. The specific enthalpy of the grains is noted H_{ts} and the thickness of the burnt powder of each grain is noted d .

Remark 1: In the sequel, we will give a relation between p_2 and p_1 (see formula (1.8)). It will then be possible to eliminate the pressure p_2 in the system (1.1)-(1.2). Thus, the Gough's system falls into the category of the so-called two-velocity one-pressure models for two-phase flows.

Remark 2: In our application, the pressure p_1 in the solutions of (1.1)-(1.2) appears to be smooth : the apparition of shock waves would indicate a bad functioning of the gun. Thus, it is not necessary to give a more precise definition of the non-conservative products in (1.2). Let us define the source terms by

$$S(W) = \begin{pmatrix} -\frac{\Gamma_c}{\rho_2} \\ \Gamma_c + \Gamma_{ign} \\ \Gamma_c u_2 - D + \Gamma_{ign} u_{ign} \\ -\Gamma_c u_2 + D \\ \Gamma_c \left(Q_{ex} + \frac{p_1}{\rho_2} + \frac{u_2^2}{2} \right) - u_2 D - A_s q_t + Q_{ign} \Gamma_{ign} \\ \kappa q_t \\ \dot{r} \end{pmatrix}.$$

In this source term :

- Γ_c is the mass transfer rate, due to combustion, from solid phase to gas phase ;
- Γ_{ign} is the mass addition rate from the igniter ;
- u_{ign} is the gas velocity from the igniter ;

- D is the interphase drag force ;
- Q_{ex} is the exothermic energy released by the solid phase during combustion ;
- Q_{ign} is the energy released by the igniter ;
- \dot{r} is the combustion rate ;
- q_t is the heat flux per specific surface unit between the two phases ;
- $A_s = \alpha_2 \frac{S_p}{V_p}$ is the specific surface of the solid phase ;
- S_p and V_p are respectively the instantaneous surface and volume of a propellant grain ;
- κ corresponds to the thermal diffusivity of the solid phase.

Remark 3: The thermal diffusion and radiation are taken into account only at the local level : in one grain, and between one grain and the surrounding gas. It means that our model will not be able to predict accurately combustion fronts that are driven by thermal diffusion or radiation. The combustion front will propagate because of the convection of hot gases. Pressure waves can also trigger the combustion by a local increase of the temperature.

In a second stage, when the pressure in the combustion chamber is greater than the resistive pressure of the bullet, the shot base begins to move.

With a moving boundary, the mesh must be adapted to the expansion of the computing domain. We use a rezoning technique that consists in a change of variables in order to obtain a virtual static computation domain. We introduce the change of variable

$$\xi = \frac{x}{x_p},$$

where x is the real position and x_p is the position of the shot base. Thus, $0 \leq \xi \leq 1$, and we obtain a new expression of the system (1.1)-(1.2)

$$\frac{\partial}{\partial t} (x_p W) + \frac{\partial}{\partial \xi} (F(W) - v_p \xi W) + C(W) \frac{\partial W}{\partial \xi} = x_p S(W) \quad (1.3)$$

In order to compute the position of the shot base x_p , we apply the fundamental principle of dynamics

$$m_p \frac{dv_p}{dt} = A (p_m - p_r), \quad (1.4)$$

where $v_p = \frac{dx_p}{dt}$ is the bullet speed, m_p its mass, A the tube section, p_m the pressure at the shot base and p_r the resistive pressure (induced by bullet/tube friction, and depending on the geometry of the system). The resistive pressure is supposed to be constant.

We consider the following wall boundary conditions :

- at the breech $u_1 = u_2 = 0$;
- at the shot base $u_1 = u_2 = v_p$.

At the initial time, the two phases are supposed to occupy homogeneously the initial volume namely the combustion chamber.

1.3 Constitutive laws

The definition of α_k as volume fraction (also called porosity) for each phase gives

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1. \quad (1.5)$$

The perfect gas equation of state is inappropriate in internal ballistic problems. High temperatures and pressures require using real gas equation of state, such as Noble and Abel law that reads

$$p_1(\rho_1, e_1) = \frac{(\gamma - 1) \rho_1 e_1}{1 - \eta \rho_1}, \quad (1.6)$$

where γ is the specific heat ratio and η is the gas covolume. The internal specific energy e_1 of the gas is given by

$$E_1 = \rho_1 \left(e_1 + \frac{u_1^2}{2} \right). \quad (1.7)$$

p_2 is defined by

$$p_2(\alpha_1, \rho_1, e_1) = p_1(\rho_1, e_1) + R_p(\alpha_1, \rho_2), \quad (1.8)$$

R_p is the intra granular stress, given in [Por88],

$$R_p = \begin{cases} 0 & \text{if } \alpha_1 > \alpha_c \\ \frac{\rho_2 c_p^2 \alpha_c (\alpha_c - \alpha_1)}{\alpha_1 (1 - \alpha_1)} & \text{if } \alpha_1 \leq \alpha_c \end{cases} \quad (1.9)$$

The critical porosity α_c is usually taken equal to the initial porosity. The velocity c_p is a measured sound speed in a particle bed far from compaction. For our configuration, it is sufficient to suppose that it is constant.

From the intra granular stress expression (1.9), it is possible to compute the speed of propagation of infinitesimal granular disturbances. It is noted a and in the sequel we shall call it the sound speed of the powder. Of course, when the porosity α_1 is far from 0, it is much smaller than the real sound speed of the incompressible compacted powder. We have

$$a^2 = \frac{R_p}{\rho_2} - \frac{\alpha_2 R_{p, \alpha_1}}{\rho_2}. \quad (1.10)$$

In our configuration, the velocity a is given by

$$a = \begin{cases} 0 & \text{if } \alpha_1 > \alpha_c \\ \frac{\alpha_c}{\alpha_1} c_p & \text{if } \alpha_1 \leq \alpha_c \end{cases}. \quad (1.11)$$

We observe that the intra granular stress is zero when the porosity (the volume fraction of gas) is sufficiently high. On the other hand, it tends to infinity when the porosity tends to zero. This latter case corresponds to the compaction of the powder. It is clear that the compaction will produce a very high sound speed in the powder. In numerical simulations this can lead to a very constraining CFL condition. Fortunately, in our application, it appears that the combustion of the powder tends to increase the porosity during the computation and that the

dominant sound speed is the sound speed of the gas. Hyperbolicity of the system (1.1)-(1.2) depends directly on the intra granular stress. A sufficient strength implies hyperbolicity of the system. The eigenvalues of the Gough model are computed in Section 1.B. For more details, we refer to [GZ79], [CH99].

Theoretical expressions have been developed to model the drag force of a single particle in a gas flow, but the more complex case of a particle bed has been modelled only from correlations. We use a limit of Ergun's correlation given in [Erg52]

$$D = f_r \frac{\varphi(\alpha_2)}{6} \rho_2 (1 - \alpha_2) \frac{S_p}{V_p} (u_1 - u_2) |u_1 - u_2| , \quad (1.12)$$

with f_r the resistive factor. The function φ depends on the shape of the grains. Here we use

$$\varphi(\alpha_2) = \begin{cases} 0.3 & \alpha_2 > 0.9 , \\ 1.75 \left(\frac{1-\alpha_2}{\alpha_2} \frac{\alpha_c}{1-\alpha_c} \right)^{0.45} & \alpha_c < \alpha_2 < 0.9 , \\ 1.75 & \alpha_2 < \alpha_c . \end{cases} \quad (1.13)$$

At last, we use the combustion law of Vieille [Vie93]

$$\dot{r} = a_r P^n + b , \quad (1.14)$$

where a , b and n are experimentally determined constants.

We describe the mass transfer rate by

$$\begin{aligned} \Gamma_c &= A_s \rho_2 \dot{r} \\ &= (1 - \alpha_1) \frac{S_p}{V_p} \rho_2 \dot{r} , \end{aligned} \quad (1.15)$$

where S_p and V_p are respectively the instantaneous surface and volume of a grain powder, computed by geometric formulas depending on the shape of the grains. Possible expressions for S_p and V_p are given below.

The heat flux q_t per unit of surface depends on the gas temperature T and particle surface temperature T_{ps} and is defined as follows

$$q_t = h_t (T - T_{ps}) , \quad (1.16)$$

with h_t the total thermal transfer coefficient, sum of convective and radiative coefficients

$$h_t = h_c + h_r . \quad (1.17)$$

The radiative coefficient is computed by

$$h_r = \varepsilon_p \sigma (T + T_{ps}) (T^2 + T_{ps}^2) , \quad (1.18)$$

with the hypothesis that the gas emissivity is equal to unity. ε_p corresponds to the particles emissivity and σ to the Stephan-Boltzmann constant.

The convective coefficient is obtained from the Nusselt number deduced from correlations (see [KRT76] for example). It reads

$$\text{Nu} = 6 \frac{h_c}{k} \frac{V_p}{S_p}, \quad (1.19)$$

where the Eucken approximation [HCB54] for polyatomic gas gives the thermal conductivity of the gas k using the viscosity coefficient μ , the universal gas constant R and the specific heat at constant volume c_v

$$k = \frac{15}{4} R \mu \left(\frac{4}{15} \frac{c_v}{R} + \frac{3}{5} \right). \quad (1.20)$$

We follow Porterie [Por88] in order to find another expression of the Nusselt number

$$\text{Nu} = 2 + 0.4 \text{Re}_p^{2/3} \text{Pr}^{1/3}, \quad (1.21)$$

where Pr is the Prandtl number defined by $\text{Pr} = \mu c_p/k$ with c_p the specific heat of the fluid at constant pressure. From (1.20), we deduce the expression of the Prandtl number for polyatomic gas

$$\text{Pr} = \frac{4\gamma}{9\gamma - 5}, \quad (1.22)$$

γ corresponding to the specific heat ratio.

The expression of the surface temperature T_{ps} is given after the integration of Fourier's law and by supposing a parabolic temperature profile in a spherical grain. See the Appendix in [Por88] for more details. We compute T_{ps} from

$$T_{ps} = T_{ps0} - \frac{3}{2} \frac{h_t H_{ts}}{k_p^2} + \left[\left(T_{ps0} - \frac{3}{2} \frac{h_t H_{ts}}{k_p^2} \right)^2 + 3 \frac{h_t H_{ts} T}{k_p^2} - T_{ps0}^2 \right]^{1/2} \quad (1.23)$$

where k_p is the thermal conductivity of particles and T_{ps0} is the initial surface temperature.

1.4 Numerical method

We use a version of the Rusanov scheme, a Godunov scheme based on an approximate Riemann solver. In general, Finite Volume Schemes are used for conservation laws. In our case, non-conservative terms induce an adaptation of the scheme. We follow the idea presented in [GHS04] for a two-fluid two-pressure model.

In order to approximate the solution, consider a space step h , a time step τ , the points $\xi_i = x_i/x_p = ih/x_p$ and the instants $t^n = n\tau$. The computations cells are $C_i =]\xi_{i-1/2}, \xi_{i+1/2}[$.

The solution $\widetilde{W} = x_p W$ of (1.3) is approximated in each cell C_i and at each time t^n by a constant vector

$$\widetilde{W}_i^n = x_p^n W_i^n \simeq \widetilde{W}(\xi, t^n), \quad \xi \in C_i. \quad (1.24)$$

The non-conservative finite volume scheme reads

$$\begin{aligned} h \left(\widetilde{W}_i^{n+1} - \widetilde{W}_i^n \right) + \tau \left(\mathcal{F}_{i+1/2}^n - \mathcal{F}_{i-1/2}^n \right) \\ + \tau \left(\mathcal{G}_{i+1/2,-}^n - \mathcal{G}_{i-1/2,+}^n \right) = \tau \widetilde{S}_i^n, \end{aligned} \quad (1.25)$$

where $\widetilde{S}_i^n = x_p^n S_i^n$. We define the numerical conservative flux by the classical Rusanov flux

$$\mathcal{F}_{i+1/2}^n = \frac{1}{2} \left(\widetilde{F}_{i+1}^n + \widetilde{F}_i^n \right) - \frac{s_{i+1/2}^n}{2} \left(\widetilde{W}_{i+1}^n - \widetilde{W}_i^n \right), \quad (1.26)$$

with

$$\widetilde{F}_i^n = F_i^n - v_p^n \xi_i W_i^n, \quad (1.27)$$

and the numerical non-conservative fluxes by

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{i+1/2,-}^n &= C(W_i^n) \frac{\widetilde{W}_{i+1}^n + \widetilde{W}_i^n}{2}, \\ \mathcal{G}_{i-1/2,+}^n &= C(W_i^n) \frac{\widetilde{W}_i^n + \widetilde{W}_{i-1}^n}{2}, \end{aligned} \quad (1.28)$$

The velocity $s_{i+1/2}$ is the maximal wave speed at the interface $i + 1/2$. It is defined by

$$\begin{aligned} s_{i+1/2}^n &= \max(s_i^n, s_{i+1}^n), \\ s_i^n &= \max(|(u_1)_i^n| + c_i^n, |(u_2)_i^n| + a_i^n). \end{aligned} \quad (1.29)$$

In practice, we only have to consider the wave speed in the gas phase : in our configuration c_i^n is always greater than the granular wave speed a_i^n and $|u_2 - u_1| \ll c$.

In order to satisfy the CFL stability condition we take the time step as

$$\tau = \delta \frac{h}{\max_{i,n} s_i^n} \quad (1.30)$$

The CFL number δ has to be < 1 . In practice, we observe a stability of the scheme when this condition is satisfied. It indicates that the source terms are not stiff compared with the convective terms.

Let us notice that the chosen non-conservative numerical flux (1.28) is arbitrary. Other choices are possible. They will give the same result when the solution pressure is smooth. On the other hand, to compute discontinuous pressure solutions, it is important to define precisely the non-conservative products and the associated numerical approximations. For more details on these topics we refer for example to the work of Sainsaulieu [Sai96] and the cited references. Recently, relaxation two-velocity two-pressure models have been designed where the

non-conservative products are associated to linearly degenerated waves and are thus naturally defined [GHS04]. It may be an elegant way to circumvent this difficulty.

The Rusanov scheme is known to be very robust but also very dissipative. This robustness is interesting here because a part of the computation occurs in a non hyperbolic regime. The hyperbolicity of the model is discussed in Section 1.B. For more precise computations it is necessary to use a higher order scheme and to modify the model in such a way that it is always hyperbolic.

Remark 4: Recently, relaxation models for two-velocity two-pressure flows have been designed that are always hyperbolic [GHS04], [SA99a]. It is possible, for some one-pressure models, to provide an approximation by a two-pressure model. In this approach it is necessary to fix a time scale τ_r at which the two pressures equilibrate. When $\tau_r \rightarrow 0$ we recover the one-pressure model. It would be interesting to construct such a two-pressure model for approximating the Gough system (but it is not an immediate application of [GHS04] or [SA99a]).

However, numerical experiments have shown that this approach, with $\tau_r = 0$, does not permit to eliminate the non hyperbolic instability on fine meshes [HH05]. To our knowledge, the construction of a general one-pressure hyperbolic model for gas-particle flows is still not achieved.

1.5 Numerical results

1.5.1 Academic validation

In order to validate our code, we first simulate a flow with constant pressure and constant velocity. It is a numerical test (no physical meaning) where we consider that no interaction occurs between the two phases and we set the intra granular stress $R_p = 0$.

The initial condition is made of two different constant states (Riemann problem) in a 1 meter length computation domain.

	α_1	ρ_1 (kg.m ⁻³)	ρ_2 (kg.m ⁻³)	u_1 (m.s ⁻¹)	u_2 (m.s ⁻¹)	p_1 (Pa)	p_2 (Pa)
Left	0.5	0.870	1587	100	100	10 ⁵	10 ⁵
Right	0.8	0.512	1587	100	100	10 ⁵	10 ⁵

TAB. 1.1 – Initial conditions, constant velocity, constant pressure.

The solution can be computed explicitly (with a source $S(W) = 0$). The velocity and pressure remain constant, and the other quantities are simply convected at the constant velocity. The proposed numerical scheme (1.26), (1.28) has the important property that it preserves exactly the constant pressure and velocity fields. Despite its simplicity, this property is not satisfied by all the classical finite volume schemes. The choice of the pressure law (1.6) is also important (see [GHS03]). This property also appears to be important to compute more complicated

configurations.

Figure 1.2 displays the results obtained with a 1000 cells mesh at a final time $t = 3$ ms (the constant velocity and pressure are not represented).

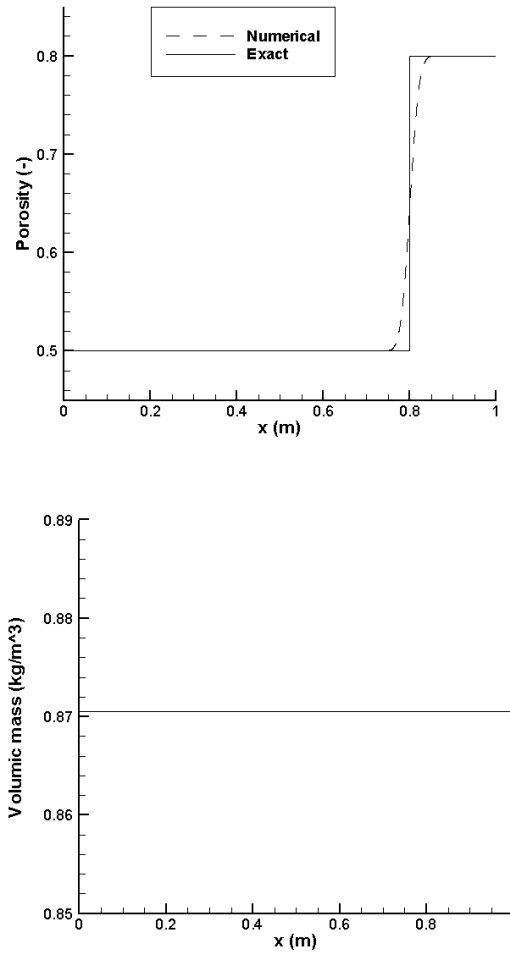


FIG. 1.2 – Porosity and density

We notice the high diffusion of the density and porosity by the Rusanov scheme on Figure 1.2. The method is only first order in time and space. It remains interesting for 1D computations, because it is always possible to refine the mesh.

1.5.2 Virtual 132 mm gun

Secondary, the simulation of a ballistic cycle in a virtual 132 mm gun [Rep82] is computed. Only the expected bullet velocity at the muzzle, the maximal pressure at the breech and shot base and shot exit time are available. We use a 100 cells mesh, with the empirical values $\gamma = 1.27$, $\eta = 1.0838 \cdot 10^{-3}$ and $\alpha_c = 0.4225$. The powder used is a 7-holes type and the corresponding geometrical functions are

$$S_p = \pi (L_0 - 2d) [D_0 - 2d + 7(d_0 + 2d)] + \frac{\pi}{2} [(D_0 - 2d)^2 - 7(d_0 + 2d)^2] ,$$

$$V_p = \frac{\pi}{4} (L_0 - 2d) [(D_0 - 2d)^2 - 7(d_0 + 2d)^2] ,$$

where L_0 , D_0 and d_0 are respectively the length, the external diameter and the perforation diameter before the combustion.

The evolutions of the breech and shot base pressures on time are displayed on Figure 1.3.

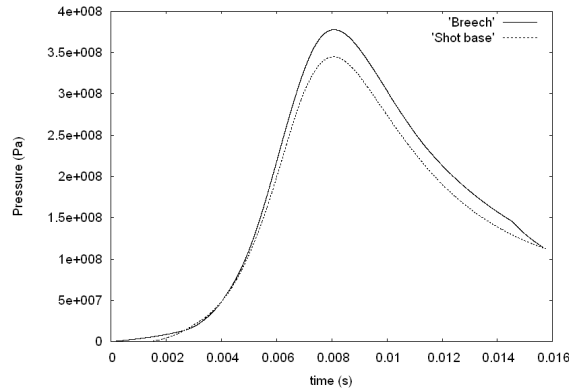


FIG. 1.3 – Evolution of pressures

Different simulations with other internal ballistic codes have given realistic ranges for the computed values. Table 1.2 summarizes the results and shows that our results are in agreement with the expected ones.

Computed value	Acceptable range	Algorithm result
Maximal shot base pressure (<i>MPa</i>)	325 – 360	344
Maximal breech pressure (<i>MPa</i>)	355 – 400	377
Muzzle velocity (<i>m.s⁻¹</i>)	660 – 705	694
Shot exit time (<i>ms</i>)	14.66 – 16.58	15.75

TAB. 1.2 – Result of simulations

1.5.3 Real 60 mm gun

At last, simulations on a 60 mm gun are compared to experimental measurements given in [Kay05]. We compare the maximal breech pressure and the muzzle velocity coming from experiments and simulation, by using three different initial powder masses : 1.17 kg, 1.365 kg and 1.4625 kg. In Table 1.3 and 1.4 the data are compared.

TAB. 1.3 – Muzzle velocity datas

Initial powder mass	Experimental result	Simulation result
1.17 kg	1000 $m.s^{-1}$	1001 $m.s^{-1}$
1.365 kg	1119 $m.s^{-1}$	1116 $m.s^{-1}$
1.4625 kg	1194 $m.s^{-1}$	1172 $m.s^{-1}$

TAB. 1.4 – Breech pressure datas

Initial powder mass	Experimental result	Simulation result
1.17 kg	367 MPa	363 MPa
1.365 kg	534 MPa	521 MPa
1.4625 kg	665 MPa	626 MPa

We observe a good agreement between the simulations and the experiments even if the precision of the model decreases with the mass of powder.

1.6 Conclusion

In this paper, we have adapted the Gough model to describe the two-phase flow with combustion in a gun. This is a non-conservative, two-velocity, one-pressure model that involves complicated source terms and lacks of hyperbolicity. We have proposed a numerical method, based on the Rusanov scheme, to simulate this kind of flow. We have been able to obtain satisfactorily results on academic and real configurations.

We have now to improve the model in several directions :

- It is important, for practical configurations, to take into account combustion chambers with variable section ;
- It would be interesting to find a relaxation two-velocity two pressure model to approximate the Gough model. In this way we could avoid the lack of hyperbolicity and then envisage higher order numerical schemes. With an appropriate two-velocity two pressure model we also hope to be able to give a simple definition of the non-conservative products (even if it is not crucial for interior ballistics) ;
- Finally, a huge work has still to be done on the modelling of the combustion process : chemical model, combustion of grains with special shapes, dependence of combustion front velocity with the convection and the diffusion, *etc.*

1.A Data set for AGARD 132 mm

TAB. 1.5 – Data set for AGARD 132 mm		
45.359d0	m_p , projectile weight	(kg)
0.132d0	A , calibre (tube section)	(m)
762.d-3	$x_p^{t=0}$, chamber length	(m)
5.08d0	$x_{p,max}$, tube length	(m)
1.d5	p_0 , initial pressure	(Pa)
294.d0	T_0 , initial temperature	(K)
294.d0	T_{ps0} , initial surface temperature	(K)
137.9d5	p_r , resistive pressure	(Pa)
21.3d0	M , molecular mass of powder	(kg/kmol)
1.0838d-3	η , covolume	(m ³ /kg)
1.27d0	γ , specific heat ratio	(-)
9.5255d0	m_c , powder charge	(kg)
1578.d0	ρ_2 , density of powder	(kg/m ³)
892.9d0	Q_{ex} , explosive heat of powder	(kcal/kg)
1445.565d0	c_v , specific heat at constant volume of powder	(m ² /(s ² .K))
0.d0	b , in the Vieille's law expression	(m/s)
3.12d-9	a_r , in the Vieille's law expression	(m/s/Pa ^b)
0.9d0	n , in the Vieille's law expression	(SI)
11.43d-3	D_0 , external diameter of grains	(m)
1.143d-3	d_0 , internal diameter of grains	(m)
25.4d-3	L_0 , length of a grain	(m)
0.5d0	f_r , resistance factor of powder	(-)
0.4225d0	α_c , critical porosity	(-)
254.d0	c_p , sound speed in the powder bed	(m/s)
0.d0	ϵ_p , radiative emission factor	(-)
8.677d-8	κ , thermal diffusivity of powder	(m ² /s)
0.2218d0	κ_p , thermal conductivity of powder	(J.m ⁻¹ .s ⁻¹ .K ⁻¹)
1.5702d6	Q_{ign} , energy released by igniter	(J/kg)
444.d0	T_{ign} , ignition temperature	(K)
13132d0	Q_{ign} , emission rate	(kg/m ³ /s)
10.d-3	igniter running time	(s)

We used a 7-holes powder. Igniter's holes are placed at 5 points

- $x = 0$ mm,
- $x = 31.75$ mm,
- $x = 63.5$ mm,
- $x = 95.24$ mm,

$x = 127$ mm.

The computations data are given in Table 1.5.

1.B Hyperbolicity domain of the model

We observe first that the hyperbolicity of the model is not affected by the rezoning : it is sufficient to study the eigenvalues of (1.1)-(1.2). The last two equations in (1.1)-(1.2) are convection equations associated to the eigenvalue $\lambda = u_2$. Thus, we concentrate on the first five equations. We rewrite the system in a new set of variables $Y = (\alpha_2, \rho_1, u_1, u_2, e_1)$. In this way, without the source terms, the system becomes

$$Y_t + B(Y)Y_x = 0, \quad (1.31)$$

with

$$B(Y) = \begin{bmatrix} u_2 & 0 & 0 & \alpha_2 & 0 \\ \frac{\rho_1}{\alpha_1}(u_2 - u_1) & u_1 & \rho_1 & \frac{\rho_1}{\alpha_1}\alpha_2 & 0 \\ 0 & \frac{p_{1,\rho_1}}{\rho_1} & u_1 & 0 & \frac{p_{1,e_1}}{\rho_1} \\ \frac{R_p}{\alpha_2\rho_2} - \frac{R_{p,\alpha_1}}{\rho_2} & \frac{p_{1,\rho_1}}{\rho_2} & 0 & u_2 & \frac{p_{1,e_1}}{\rho_2} \\ \frac{p_1(u_2 - u_1)}{\alpha_1\rho_1} & 0 & \frac{p_1}{\rho_1} & \frac{p_1\alpha_2}{\rho_1\alpha_1} & u_1 \end{bmatrix}. \quad (1.32)$$

In order to simplify it further, we consider the gas entropy $s(\rho_1, e_1)$ satisfying

$$T_1 ds = de_1 + p_1 d\left(\frac{1}{\rho_1}\right), \quad (1.33)$$

where T_1 is the gas temperature. The entropy also satisfies

$$\rho_1 s_{\rho_1} = -\frac{p_1}{\rho_1} s_{e_1}. \quad (1.34)$$

Multiplying the last equation in (1.31) by s_{e_1} and the second by s_{ρ_1} and adding the two we find a new system

$$\begin{aligned} U &= (\alpha_2, \rho_1, u_1, u_2, s), \\ U_t + C(U)U_x &= 0, \\ C(U) &= \begin{bmatrix} u_2 & 0 & 0 & \alpha_2 & 0 \\ \frac{\rho_1}{\alpha_1}(u_2 - u_1) & u_1 & \rho_1 & \frac{\rho_1}{\alpha_1}\alpha_2 & 0 \\ 0 & \frac{p_{1,\rho_1}}{\rho_1} & u_1 & 0 & \frac{p_{1,s}}{\rho_1} \\ \frac{R_p}{\alpha_2\rho_2} - \frac{R_{p,\alpha_1}}{\rho_2} & \frac{p_{1,\rho_1}}{\rho_2} & 0 & u_2 & \frac{p_{1,s}}{\rho_2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (1.35)$$

The sound speed in the gas is noted c . It is given by

$$c^2 = \frac{\partial}{\partial \rho_1} p_1(\rho_1, s). \quad (1.36)$$

The sound speed a in the powder bed is given by (1.11).

In this way, we have

$$C(U) = \begin{bmatrix} u_2 & 0 & 0 & \alpha_2 & 0 \\ \frac{\rho_1}{\alpha_1}(u_2 - u_1) & u_1 & \rho_1 & \frac{\rho_1}{\alpha_1}\alpha_2 & 0 \\ 0 & \frac{c^2}{\rho_1} & u_1 & 0 & \frac{p_{1,s}}{\rho_1} \\ \frac{a^2}{\alpha_2} & \frac{c^2}{\rho_2} & 0 & u_2 & \frac{p_{1,s}}{\rho_2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 \end{bmatrix}$$

The characteristic polynomial is then

$$(u_1 - \lambda) \left[((u_2 - \lambda)^2 - a^2) ((u_1 - \lambda)^2 - c^2) - c^2 \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \frac{\rho_1}{\rho_2} (u_1 - \lambda)^2 \right]$$

We define $y = \frac{\lambda - u_1}{c}$ that has to be a root of

$$\begin{aligned} Q_4(y) &= Q_2(y) \\ Q_4(y) &:= (y^2 - 1) \left((y - \frac{u_2 - u_1}{c})^2 - \frac{a^2}{c^2} \right) \\ Q_2(y) &:= \frac{1 - \alpha_1}{\alpha_1} \frac{\rho_1}{\rho_2} y^2 \end{aligned}$$

It is easy to check that Q_2 and Q_4 have at least two real intersections. For the two other roots, general analytic conditions cannot be obtained but we can indicate sufficient conditions for hyperbolicity (or ellipticity)

1. $a = 0, u_1 = u_2$: the system is hyperbolic.
2. $a = 0, u_1 \neq u_2, -1 \leq \frac{u_2 - u_1}{c} \leq 1$: the system is not hyperbolic.
3. $a < c, |u_2 - u_1| \leq \max(a, c - a)$: the system is hyperbolic. This sufficient condition is simply obtained by requiring that $Q_4(0) > Q_2(0)$ when all the roots of Q_4 are in $[-1, 1]$.

Let us observe that in our computations we are generally in the cases 2 or 3. During the ballistic process, the combustion of the powder tends to increase the porosity. Thus, case 3 is observed only at the beginning of the computation, when $\alpha_1 \simeq \alpha_c$ (see (1.11)). The intra granular stress plays here an important role to stabilize the computation.

Although the rest of the computation occurs in a non-hyperbolic regime we did not observe instabilities. This is certainly due to several dissipative mechanisms :

- the numerical viscosity of the Rusanov scheme is known to be high, compared to other schemes. Typically, if the drag force is set to 0, instabilities begin to appear for 10 000 cells in 1D computations (see [HH05]) ;
- the drag force plays an important role to damp the oscillations as demonstrated by Hérard in [HH05]. The scheme can remain stable up to 500 000 cells computations ;
- our case corresponds to small velocity differences $u_2 - u_1$ and the size of the imaginary part of the complex eigenvalues tends to 0 with $u_2 - u_1$.

With finer meshes, or higher order schemes, it will be necessary to improve the stability of the initial model. A simple way to do that is to modify the intra granular stress expression

(1.9) in such a way that a is always > 0 , as in [CH99] or [GZ79].

L'étude de l'hyperbolicité nous a permis de constater que nous nous trouvons souvent dans une poche d'ellipticité. Pour les raisons citées plus haut, les calculs restent stables. Notre méthode numérique est donc validée. Pourtant, si on veut améliorer la précision des résultats, par exemple par le biais d'une montée en ordre du schéma numérique ou par l'utilisation d'un maillage plus fin, nous risquons d'être confronté aux oscillations numériques. Dans la suite nous essayons d'améliorer notre approche initiale dans deux directions :

1. introduire une méthode à pas fractionnaires : on décompose le système conditionnellement hyperbolique en deux sous-systèmes hyperboliques que l'on résout l'un après l'autre. Cette méthode est plus lourde en calculs et fait perdre de la précision (à paramètres de simulations équivalents) par rapport à la méthode directe, mais permet de conserver le modèle de Gough en l'état. L'apparition des instabilités est repoussée à des maillages très fins. De plus, le choix de la vitesse des ondes dans le schéma de Rusanov n'est plus arbitraire.
2. développer un modèle de relaxation à deux pressions inconditionnellement hyperbolique : plus complexe que notre SEDP et en considérant la phase solide comme compressible, le système sera constitué de six équations de conservation (contre cinq dans le modèle de Gough) et de trois équations de transport. La pression de chaque phase évolue de manière indépendante pendant le calcul et un terme de relaxation modifie le système pour faire tendre les pressions vers un équilibre à la fin du pas de temps. Si la relaxation est instantanée en temps, le système retrouvera un comportement instable dans les poches elliptiques.

Ces deux possibilités sont traitées dans les chapitres trois (pour la méthode à pas fractionnaires) et quatre (pour le modèle à deux pressions) qui vont suivre.

Le modèle d'allumage que nous venons de décrire est particulièrement simple. On considère que la combustion (transfert de masse et d'énergie du solide vers le gaz) débute lorsque la température de surface atteint une température d'allumage déterminée expérimentalement. Un tel critère ne permet pas de rendre compte des effets dus aux variations du flux de chaleur reçu par le grain ou aux différences de paramètres physiques et chimiques des simulations. Une grande partie des travaux de cette thèse a pour but de déterminer un nouveau critère d'allumage plus réaliste. Son développement est exposé dans le prochain chapitre.

Chapitre 2

Allumage et combustion

Le début du cycle balistique commence par l'allumage de la poudre propulsive. Un capillaire perforé appelé allumeur et contenant une poudre très vive est placé dans la chambre de combustion. La poudre de l'allumeur est allumée par un mécanisme piézo-électrique et la combustion produit des gaz chauds. Ces gaz chauds s'échappent du capillaire par les événements et viennent se propager dans le lit de poudre propulsive de la chambre de combustion. Le transfert thermique, principalement convectif, chauffe les grains de poudre jusqu'à ce qu'ils s'enflamment, produisant à leur tour des gaz. La pression dans la chambre augmente donc et lorsqu'elle est suffisamment importante au culot du projectile, entraîne le déplacement du projectile.

La détermination du délai d'allumage est importante. Elle permet d'évaluer les performances d'un système de propulsion en fonction du type de matériau énergétique utilisé et de prévoir les éventuels dysfonctionnements. Un cas critique est par exemple un long délai d'allumage. La combustion s'initie tardivement ce qui entraîne une forte compaction du lit de poudre par les gaz issus de l'allumeur. Une zone de forte contrainte intragranulaire apparaît alors pouvant entraîner la fracturation des grains et ainsi augmenter la surface de décomposition du solide, et donc la production de gaz. On peut alors observer le développement d'ondes de pression catastrophiques pour les performances et la sécurité du système.

L'allumage puis la combustion d'une poudre propulsive est un phénomène complexe encore mal connu. L'échauffement des grains, étape initiale de la chaîne de combustion est bien modélisé par l'équation de la chaleur. Par contre, lorsque l'on s'approche de l'initiation de la combustion (phase dite d'*allumage*), les modèles deviennent plus diversifiés et sujets à controverses. De plus, les moyens de mesures expérimentales restent très limités à cause de la violence du processus d'allumage et de la diversité des réactions chimiques mises en jeu lors de la combustion (des dizaines d'espèces chimiques réagissant dans des centaines de réactions en parallèle). Les conditions réelles dans une chambre de combustion sont particulièrement extrêmes : fortes pressions, hautes températures, compaction du lit de poudre. Les appareils de mesure risquent d'être endommagés et nécessitent des fréquences d'échantillonnage très élevées. Certaines mesures restent difficiles, voire impossibles : concentrations en espèces chi-

miques, champs de vitesse...

Le cycle de combustion se décompose en trois parties chronologiques :

1. l'échauffement de la poudre par un flux de chaleur convectif. De l'énergie est apportée au grain à sa surface par les gaz issus de l'allumeur, ce qui entraîne l'augmentation de sa température de surface et l'apparition d'un profil de température à l'intérieur du grain ;
2. l'allumage de la poudre, qui correspond au début de la réaction chimique de décomposition du matériau énergétique solide en gaz ;
3. la combustion, c'est-à-dire le transfert de masse et d'énergie de la poudre vers le gaz.

Il existe des modèles pour chacune de ces étapes. Le but de ce chapitre est de proposer des modèles améliorés et des méthodes adaptées pour ces trois points. L'échauffement de la poudre est modélisé par l'équation instationnaire de la chaleur dans la phase solide. Diverses méthodes numériques existent pour résoudre le problème, mais notre cahier des charges nous impose de recourir à des algorithmes rapides et légers. Nous développons en ce sens une méthode de calcul de l'évolution de la température de surface en approchant le profil de la température dans le grain par des polynômes.

Comme expliqué précédemment, le délai d'allumage est très difficile à déterminer. Le critère d'allumage le plus répandu est totalement empirique : il y a allumage lorsque la température de surface des grains atteint une température donnée, mesurée expérimentalement. Or l'allumage des matériaux énergétiques dépend fortement de l'évolution des conditions d'utilisation (température initiale, pression, flux de chaleur reçu) qui n'est pas reproductible avec un tel critère. En particulier, l'influence de la température initiale est importante lorsque les conditions d'utilisation sont particulières, par exemple en milieu désertique ou polaire. Nous proposons donc un modèle d'allumage qui est adapté des travaux de Lengellé et *al* [LBDA91]. L'introduction d'un modèle simplifié de combustion en phase solide permet de raisonner non plus en terme de température mais de bilan d'énergie. On considère que la combustion démarre lorsque l'énergie dégagée par la réaction exothermique de décomposition du solide devient non négligeable par rapport à l'énergie apportée par le flux de chaleur extérieur.

Le dernier point faible des modèles de combustion se situe au niveau de la loi de combustion. À forte pression, la vitesse de combustion dépend uniquement de la pression et l'effet de la température est négligeable. La loi de Vieille [Vie93] est empirique et décrit la vitesse de combustion u_s par la relation

$$u_s = a_n P^n, \quad (2.1)$$

où a_n et n sont des constantes et P la pression. Cette loi est vérifiée et validée pour des pressions relativement hautes. Le problème se situe lors du début de la combustion, à basse pression, où la loi de Vieille atteint sa limite : dans ce cas, la combustion est dominée par la température ambiante des gaz et l'influence de la pression décroît. Afin de développer un modèle plus réaliste pour les faibles pressions, nous nous inspirons des travaux de l'équipe de Brewster [JMB04], [WBT05]. Nous proposons de résoudre l'équation de la chaleur dans le solide à laquelle est associée une équation décrivant la fraction massique d'espèces inertes

dans le solide, ainsi que les équations décrivant le profil de température et de fraction massique d'espèces chimiques réactives en phase gazeuse. Des développements de Brewster et *al.* sur la modélisation de la phase gazeuse [BS95], [BWS00], [Bre00] permettent de considérer uniquement la forme stationnaire des équations dans le gaz. Nous proposons alors un nouveau modèle de combustion à basse pression.

Les mesures expérimentales étant difficiles à réaliser, certaines données sont délicates à obtenir, en particulier celles concernant la cinétique des réactions chimiques. La détermination de ces valeurs pour certaines poudres est en cours. La validation de notre modèle de combustion sera donc pour l'instant qualitative. Nous étudierons le comportement du modèle lorsqu'on fait varier certains paramètres de simulations et le comparerons à ceux observés expérimentalement dans le cas général des poudres propulsives.

2.1 Modélisation de l'échauffement

On considère la configuration unidimensionnelle suivante (illustrée par la figure 2.1) : la phase solide (à gauche de l'interface) est soumise à un flux de chaleur par unité de surface noté $\phi_e(t)$ provenant de la phase gazeuse.

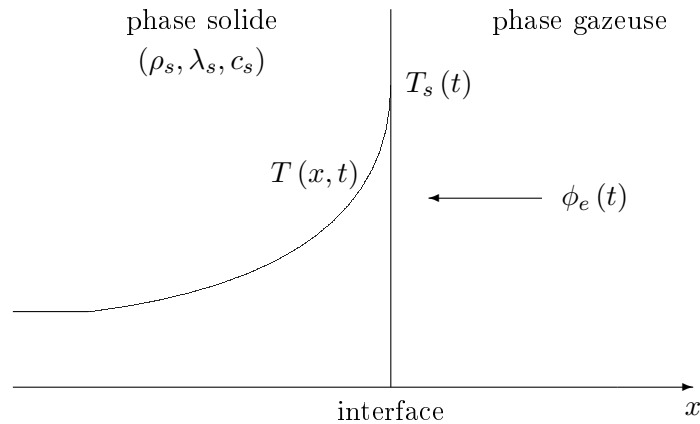


FIG. 2.1 – Schéma du problème unidimensionnel

La modélisation de l'évolution de la température nécessite la résolution de l'équation de la chaleur instationnaire dans le solide à laquelle on ajoute un terme correspondant à la réaction chimique en phase solide

$$\rho_s c_s \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \lambda_s \Delta T(x,t) + \omega_s(x,t) Q_{ex,s} \quad (2.2)$$

avec ρ_s la densité, c_s la chaleur spécifique et λ_s la conductivité thermique du solide. $T(x, t)$ est la température où x et t sont respectivement les variables spatiale et temporelle, Δ représente l'opérateur laplacien et ∂ correspond à la dérivée partielle. Le terme $Q_{ex,s}$ correspond à l'énergie chimique dégagée lors de la combustion et on note $\omega_s(x, t)$ le taux de réaction, considéré comme nul pour l'instant (tant que l'allumage n'a pas eu lieu).

À $t = 0$, la température est uniforme dans le solide et égale à T_0 , d'où

$$T(x, 0) = T_0. \quad (2.3)$$

Les conditions aux limites appliquées à (2.2) sont de la forme

$$\begin{cases} T(-\infty, t) = T_0, \\ T(0, t) = T_s(t). \end{cases} \quad (2.4)$$

La température de surface $T_s(t)$ est inconnue. On considère que le grain est un solide semi-infini, c'est-à-dire que la température à l'infini reste constante et égale à T_0 . En pratique, on suppose que la température au cœur de la particule reste constante au cours de la simulation. À la surface, le bilan d'énergie appliqué à une fine épaisseur sous l'interface nous donne

$$\frac{dE_s}{dt} = P_c + P_r, \quad (2.5)$$

avec E_s l'énergie du volume élémentaire, P_c la puissance chimique libérée par la réaction chimique de combustion (considérée comme nulle pour l'instant) et P_r la puissance reçue. On pose

$$\frac{dE_s}{dt} = \rho_s c_s V \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (2.6a)$$

$$P_c = 0, \quad (2.6b)$$

$$P_r = A_{\text{ext}} \phi_e(t) - A_{\text{int}} \lambda_s \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (2.6c)$$

avec V , A_{ext} et A_{int} (resp.) les volume, surface extérieure et intérieure de l'épaisseur considérée. Considérant que la forme la plus répandue des grains de poudre est cylindrique, on utilise une formulation dans le système de coordonnées cylindriques pour calculer V , A_{ext} et A_{int} , ce qui nous donne

$$\begin{aligned} V &= \pi l \left(r_e^2 - (r_e - \Delta x)^2 \right) \\ A_{\text{ext}} &= 2 \pi r_e l \\ A_{\text{int}} &= 2 \pi (r_e - \Delta x) l \end{aligned} \quad (2.7)$$

On note r_e le rayon extérieur du cylindre, l sa longueur et dx le pas de discrétisation en espace que l'on choisit.

Dans les problèmes de balistique intérieure, l'échauffement de la poudre se fait par transfert thermique entre un écoulement de gaz à une température élevée T_g et la surface du grain de poudre. Notre flux de chaleur par unité de surface $\phi_e(t)$ s'écrit

$$\phi_e(t) = h_t(t) (T_g - T_s(t)), \quad (2.8)$$

avec $h_t(t)$ le coefficient d'échange thermique par unité de surface calculé à partir de relations empiriques. Ce transfert thermique est principalement convectif. Mathématiquement, la condition aux limites à la surface (2.5) peut être exprimée plus simplement en faisant tendre l'épaisseur du volume élémentaire vers zéro, ce qui revient alors à écrire

$$-\lambda_s \frac{\partial T}{\partial x} + \phi_e(t) = 0. \quad (2.9)$$

On peut donc en déduire la température de surface en fonction de l'évolution du flux de chaleur reçu. Toutes les équations du modèle étant posées, il reste encore à déterminer la méthode numérique pour résoudre le système (2.2),(2.3),(2.4). Il est à noter que des solutions analytiques existent pour des cas particuliers [ID02] mais ne sont pas applicables dans notre cas.

La méthode des différences finies est simple et permet d'avoir une bonne précision mais nécessite un temps de calcul et un espace mémoire conséquents, ce qui est incompatible avec notre cahier des charges : la méthode numérique sera implémentée dans un code de simulation d'écoulements diphasiques tridimensionnels, il nous faut donc un compromis entre rapidité, légèreté et précision (lors de la phase d'échauffement, ce système sera résolu dans chaque volume du maillage). Cependant, nous étudierons donc la méthode des différences finies pour obtenir des résultats qui seront considérés comme références pour les autres méthodes approchées qu'on développera.

L'idée est de suivre les méthodes utilisées dans les codes de balistique intérieure AMI (Achsensymmetrisches Modell der Innenballistik développés par Heiser et Hensel [HH86],[HH85]) ou MOBIDIC (MOdélisation de la Balistique Intérieure DIMensionnelle des Canons [Ca81]) : on approche la forme du profil de la température dans le solide par une fonction dont certains paramètres deviennent les nouvelles inconnues. Celles-ci sont déterminées grâce aux conditions initiales et aux limites. Plusieurs profils sont possibles. En général, on suppose un profil polynomial (parabolique pour l'AMI [Por88], cubique pour le MOBIDIC [PR00], éventuellement associé à une méthode intégrale [PKCS73],[LK94]).

2.1.1 Algorithme par différences finies

Nous étudions dans cette partie l'algorithme associé à la méthode des différences finies. Les résultats précis qu'on obtient serviront de référence pour comparer les résultats de simulations avec les autres méthodes numériques étudiées.

L'équation (2.2) est discrétisée en temps et en espace. On pose $T_i^n = T(x_i, t^n)$ avec $x_i = i dx$ et $t^n = n dt$, où dx et dt sont respectivement les pas d'espace et de temps, i et n les numéros de la cellule et du pas de temps. Les dérivées temporelles sont évaluées suivant un schéma

explicite et les dérivées spatiales par un schéma centré, c'est-à-dire

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{dt}, \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_{i-1}^n - T_{i+1}^n}{2 dx}, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{dx^2}, \quad (2.12)$$

et on résout de façon itérative. Le schéma explicite nécessite l'allocation mémoire de deux vecteurs \mathbf{T}^n et \mathbf{T}^{n+1} de taille N , N étant le nombre de points de discrétisation, et le pas de temps doit vérifier la condition de stabilité [KB59]

$$dt \leq \frac{1 dx^2}{2 \alpha_s} \quad (2.13)$$

avec $\alpha_s = \frac{\lambda_s}{\rho_s c_s}$ la diffusivité thermique de la poudre. Pour les cellules intérieures, le schéma développé s'écrit

$$T_i^{n+1} = T_i^n + dt \alpha_s \left(\frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{dx^2} - \frac{r}{x_i} \frac{T_{i+1}^n - T_{i-1}^n}{2 dx} \right), \quad \forall 1 \leq i \leq N-1 \quad (2.14)$$

où $r = 0$ dans le cas d'un système de coordonnées cartésiennes, $r = 1$ dans le cas cylindrique et $r = 2$ dans le cas sphérique, tandis qu'à l'interface, pour $i = N$ on a

$$T_s^{n+1} = T_N^{n+1} = T_s^n + \frac{dt}{\rho_s c_s V} \left(A_{\text{ext}} \phi_e(t^n) + A_{\text{int}} \lambda_s \frac{T_{N-1}^n - T_s^n}{dx} \right) \quad (2.15)$$

et au centre du grain

$$T_0^n = T_0 \quad \forall n \in \mathbb{R}_+. \quad (2.16)$$

2.1.2 Approximation polynomiale sur le profil

Nous nous penchons maintenant vers une méthode alternative d'approximation de la solution de l'équation de la chaleur (2.2) que l'on veut moins coûteuse en temps de calculs et en espace mémoire que l'algorithme associé à la méthode des différences finies, tout en conservant une précision acceptable.

On suppose que le profil de température à l'intérieur du solide peut être décrit par un polynôme de degré p . Les coefficients de ce polynôme sont inconnus et doivent donc être déterminés. Pour cela, on utilise les différentes conditions initiales et aux limites. Nous utiliserons une écriture particulière du polynôme pour réduire le nombre d'inconnues.

On définit δ comme la profondeur de l'onde thermique dans le grain, c'est-à-dire au delà de laquelle on peut considérer que $T(x, t) \approx T_0$. Comme l'échauffement d'un grain est très rapide, l'onde thermique pénètre peu à l'intérieur du grain, ce qui implique qu'on aura toujours

$$\delta \ll r_e. \quad (2.17)$$

On suppose que le profil de la température à l'intérieur du solide peut être approché par une fonction définie par morceaux qui s'écrit

$$T(x, t) = \begin{cases} T_0 + B(t) (\delta + x)^p & \text{si } -\delta \leq x \leq 0, \\ T_0 & \text{si } x < -\delta, \end{cases} \quad (2.18)$$

où la température est considérée égale à T_0 au delà de δ et où le profil sous la surface est modélisé par un polynôme d'ordre p . À partir de cette expression on obtient un profil continu et dérivable p fois, y compris pour $x = \delta$. Dans MOBIDIC, p est égal à 3, mais nous proposons de développer la méthode pour un degré p quelconque.

On pose $Q_s(t)$ la quantité de chaleur absorbée par le grain par unité de surface, qui s'exprime par

$$Q_s(t) = \frac{E_s(t) - E_0}{A_{\text{ext}}}, \quad (2.19)$$

où E_0 et $E_s(t)$ sont les énergies au temps initial et à un temps donné qui s'écrivent (en coordonnées cartésiennes)

$$\begin{aligned} E_0 &= \rho_s c_s A_{\text{ext}} \int_{-r_e}^0 T_0 dx = \rho_s c_s A_{\text{ext}} r_e T_0, \\ E_s(t) &= \rho_s c_s A_{\text{ext}} \int_{-r_e}^0 T(x, t) dx, \end{aligned} \quad (2.20)$$

r_e étant la profondeur du grain. Or comme on peut écrire

$$\int_{-r_e}^0 T(x, t) dx = \int_{-r_e}^{-\delta} T(x, t) dx + \int_{-\delta}^0 T(x, t) dx, \quad (2.21)$$

on peut obtenir $Q_s(t)$ sous la forme

$$Q_s(t) = \rho_s c_s \left(\int_{-r_e}^{-\delta} (T(x, t) - T_0) dx + \int_{-\delta}^0 (T(x, t) - T_0) dx \right). \quad (2.22)$$

Comme on a défini l'approximation de $T(x, t)$ par

$$T(x, t) = T_0 \text{ si } -r_e \leq x \leq -\delta \quad (2.23)$$

on obtient donc la relation

$$Q_s(t) = \rho_s c_s \int_{-\delta}^0 (T(x, t) - T_0) dx = \rho_s c_s B(t) \frac{\delta^{p+1}}{p+1}. \quad (2.24)$$

On sait que la quantité infinitésimale d'énergie absorbée $\delta Q_s(t)$ pendant un temps très court δt peut être approchée par

$$\delta Q_s(t) = \phi_e(t) \delta t \quad (2.25)$$

avec $\phi_e(t)$ considéré comme constant pendant δt . On peut donc écrire

$$\frac{dQ_s(t)}{dt} = \phi_e(t) . \quad (2.26)$$

D'après (2.24), on a

$$\begin{aligned} \frac{dQ_s(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\rho_s c_s \int_{-\delta}^0 (T(x,t) - T_0) dx \right) \\ &= \int_{-\delta}^0 \left(\rho_s c_s \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} \right) dx \end{aligned}$$

D'après (2.2), on obtient alors

$$\frac{dQ_s(t)}{dt} = \int_{-\delta}^0 \left(\lambda_s \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} \right) dx , \quad (2.27)$$

d'où

$$\phi_e(t) = \lambda_s p B(t) \delta^{p-1} \quad (2.28)$$

On observe que

$$T_s(t) = T(0,t) = T_0 + B(t) \delta^p \quad (2.29)$$

et en combinant (2.24) et (2.28), on obtient l'expression approchée de $T_s(t)$

$$T_s(t) = T_0 + \sqrt{\frac{p+1}{p} \frac{\phi_e(t) Q_s}{\lambda_s \rho_s c_s}} \quad (2.30)$$

Le calcul de la température de surface est donc maintenant possible : à chaque pas de temps on calcule la nouvelle quantité totale d'énergie absorbée par le grain par la résolution de l'équation différentielle (2.26)

$$\frac{dQ_s(t)}{dt} = \phi_e(t) ,$$

et on en déduit la température de surface par l'expression analytique (2.30). Le seul paramètre à choisir est le degré p du polynôme d'approximation. Nous étudierons l'influence de p sur les résultats en exécutant plusieurs simulations avec différents degrés p .

Une philosophie similaire peut être appliquée avec différentes variantes. Peretz et son équipe utilisent une méthode intégrale [Goo64] associée à un polynôme d'ordre trois qui aboutit à une équation différentielle ordinaire sur $T_s(t)$ [PKCS73], réutilisée par Lu [LK94] et Di Giacinto [Gia00] et qui s'exprime

$$\frac{dT_s(t)}{dt} = \frac{4 \alpha_s h_t^2 (T_g - T_s(t))^3}{3 \lambda_s^2 (T_s(t) - T_0) (2T_g - T_s(t) - T_0)} . \quad (2.31)$$

L'annexe 1 de la thèse de Porterie [Por88] décrit le développement à partir d'un polynôme du second ordre dont la forme développée s'écrit

$$T(x,t) = a(t) + b(t) x + c(t) x^2 \quad (2.32)$$

pour aboutir à l'expression de $T_s(t)$

$$T_s(t) = T_0 - \frac{3 h_t(t) H(t)}{2 \lambda_s^2} + \left[\left(T_0 - \frac{3 h_t(t) H(t)}{2 \lambda_s^2} \right)^2 + 3 \frac{h_t(t) H(t) T_g}{\lambda_s^2} - T_0^2 \right]^{1/2} \quad (2.33)$$

où h_t est le coefficient de transfert thermique et $H(t)$ peut être vue comme une enthalpie qui est déterminée par l'équation différentielle ordinaire

$$\frac{dH(t)}{dt} = \alpha_s h_t(t) (T_g - T_s(t)) . \quad (2.34)$$

2.1.3 Comparaison des méthodes

Après avoir exposé les différents modèles approchés, on cherche maintenant à déterminer lequel correspond le plus à nos besoins. Nos cas tests sont les suivants : un matériau énergétique est soumis à un flux de chaleur $\phi_e(t)$ qui est de la forme

1. $\phi_e(t) = h_{t,0} (T_{g,0} - T_s(t))$, avec $h_{t,0}$ et $T_{g,0}$ constants ;
2. $\phi_e(t) = h_t(t) (T_g(t) - T_s(t))$, où $h_t(t)$ et $T_g(t)$ sont fonctions du temps. Ce cas est rencontré dans les problèmes de balistique intérieure, la température des gaz dans la chambre augmentant à cause de l'ajout de gaz chauds issus de l'allumeur. L'évolution des gaz pour ce cas test est issue d'une simulation par le code AMI.

Le tableau 2.1 donne les caractéristiques du matériau énergétique.

ρ_s	$1.578 \cdot 10^6 \text{ g.m}^{-3}$
c_s	$1.62 \text{ J.g}^{-1}.\text{K}^{-1}$
λ_s	$22.18 \cdot 10^{-2} \text{ J.m}^{-1}.\text{s}^{-1}.\text{K}^{-1}$
r_e	$5.715 \cdot 10^{-3} \text{ m}$
T_0	294 K

TAB. 2.1 – Données thermodynamiques du matériau énergétique

Pour la méthode des différences finies, on choisit un maillage de $5 \cdot 10^5$ mailles. Un tel maillage permet d'être précis pour le calcul du profil de température à l'intérieur du solide, en particulier pour capturer l'onde thermique qui pénètre peu dans la profondeur du grain, comme indiqué précédemment. On conserve le même pas de temps dt pour toutes les simulations, en respectant la condition de stabilité (2.13) de la méthode des différences finies. On simule à chaque fois 10^{-5} seconde.

– $\phi_e(t) = h_{t,0} (T_{g,0} - T_s(t))$

Le matériau énergétique est placé dans un gaz chaud où $T_{g,0} = 2000 \text{ K}$ et la pression est de 10^5 Pa . Le gaz suit la loi des gaz parfaits. $h_{t,0} = 67197 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ est déterminé grâce à des relations empiriques qui seront détaillées page 35.

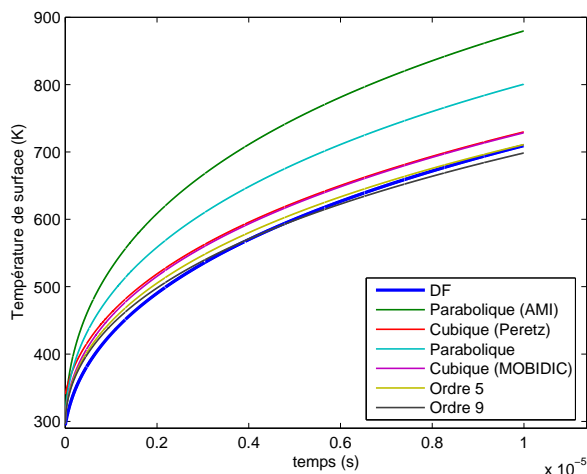


FIG. 2.2 – Évolution de la température de surface, $\phi_e(t) = \text{constante}$

La figure 2.2 représente l'évolution en temps de la température de surface en fonction de l'algorithme de résolution. On peut considérer la solution donnée par différences finies comme référence (courbe bleue foncée). La courbe verte correspond à la méthode implémentée dans le code AMI où la température de surface est donnée par (2.33) à partir d'un profil parabolique. La courbe rouge correspond à l'équation (2.31) développée par Peretz et *al.* Les quatre dernières courbes correspondent à la méthode détaillée précédemment qui a aboutit à l'équation (2.30), avec $p = 2$ (profil parabolique), $p = 3$ (profil cubique utilisé dans le code MOBIDIC), $p = 5$ et $p = 9$.

L'hypothèse d'un profil parabolique est trop grossière et donne de mauvais résultats, quelle que soit la formule utilisée ((2.30) ou (2.33)).

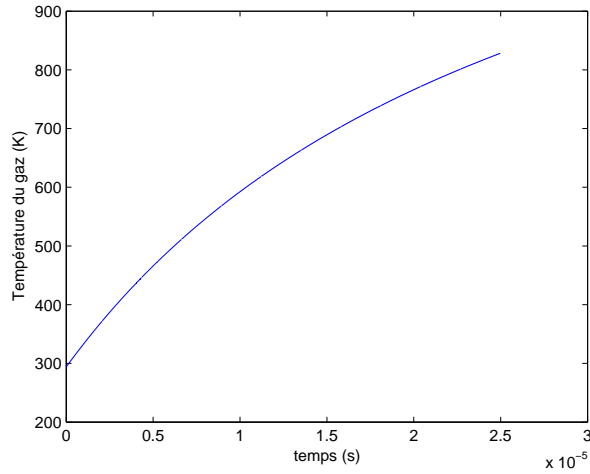
Les méthodes numériques pour des polynômes d'ordre trois donnent des résultats équivalents et corrects.

On observe qu'il n'est pas nécessaire d'utiliser un polynôme d'ordre élevé pour avoir une bonne approximation de la solution, et même qu'un ordre trop élevé peut entraîner une perte de précision.

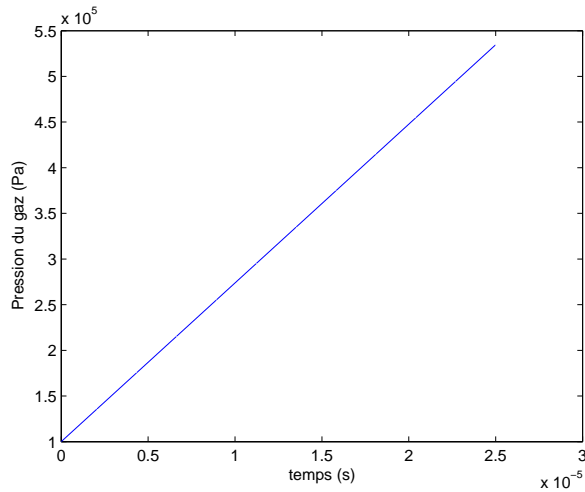
– $\phi_e(t) = h_t(t) (T_g(t) - T_s(t))$

Nous considérons maintenant un cas proche des phénomènes de balistique intérieure. Le grain de forme cylindrique est maintenant déposé dans une enceinte fermée et est soumis à un jet de gaz chauds se déplaçant à une vitesse de $u_g = 100 \text{ m.s}^{-1}$. La température et la pression ambiante augmentent et la viscosité ainsi que la conductivité thermique de la phase gazeuse se trouvent modifiées. La figure 2.3 illustre l'évolution de la température

(a) et de la pression (b) du gaz.



a - Évolution de T_g



b - Évolution de la pression dans la chambre

FIG. 2.3 – Simulation d'allumeur

On ne considère ici que les transferts thermiques convectifs. Le coefficient de transfert $h_t(t)$ est obtenu à partir du nombre de Nusselt Nu calculé par des relations empiriques (par exemple [KRT76])

$$h_t = \frac{Nu}{6} \lambda_g \frac{S_p}{V_p} \quad (2.35)$$

où l'approximation d'Eucken [HCB54] pour les gaz polyatomiques relie la conductivité thermique λ_g du gaz au coefficient de viscosité μ_g , la constante universelle des gaz R_u

et la chaleur spécifique à volume constant $c_{v,g}$

$$\lambda_g = \frac{15}{4} R_u \mu_g \left(\frac{4}{15} \frac{c_{v,g}}{R_u} + \frac{3}{5} \right). \quad (2.36)$$

Le nombre de Nusselt peut également être exprimé [Por88] par la corrélation de Gelperin-Einstein pour les lits fluidisés [GE71] modifiée par ajout d'un terme correspondant à la conduction pure [ED72]

$$\text{Nu} = 2 + 0.4 \text{Re}^{2/3} \text{Pr}^{1/3}, \quad (2.37)$$

où Re et Pr sont respectivement les nombres de Reynolds et de Prandtl définis par

$$\text{Re} = d_h \frac{\rho_g}{\mu_g} u_g, \quad (2.38)$$

$$\text{Pr} = c_{p,g} \frac{\mu_g}{\lambda_g}, \quad (2.39)$$

avec d_h le diamètre "hydraulique" du grain donné par

$$d_h = 6 \frac{V_p}{S_p}, \quad (2.40)$$

ρ_g et $c_{p,g}$ la masse volumique et la chaleur spécifique à pression constante du gaz.

On décrit μ_g par une loi de Sutherland qui s'écrit

$$\mu_g(T_g) = \frac{c_{1,v}}{c_{2,v} + T_g(t)} T_g(t)^{1.5} \quad (2.41)$$

$c_{1,v}$ et $c_{2,v}$ étant des constantes. On peut donc calculer Re et Pr à l'aide des données d'entrée, puis en déduire le nombre de Nusselt en utilisant (2.37). Connaissant la géométrie d'un grain et donc d_h , le coefficient de transfert thermique h_t est ainsi calculé à partir de (2.35).

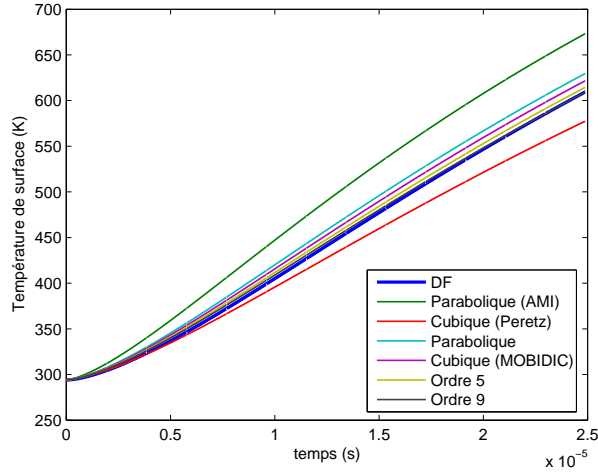
La figure 2.4 regroupe les résultats des différentes simulations.

Concernant le choix de l'ordre des polynômes, les mêmes conclusions peuvent être faites que pour le cas test précédent. On remarque cependant que la méthode intégrale (en rouge) donne maintenant de moins bons résultats.

Les deux cas tests démontrent que l'utilisation de polynômes est judicieuse à condition de choisir un ordre supérieur ou égal à trois.

Remarque 5: Pour ϕ_e constant, l'expression analytique de la température de surface est possible [LBDA91]

$$T_s^*(t) = T_0 + 2 \frac{\phi_e}{\lambda_s} \sqrt{\frac{\lambda_s}{\pi \rho_s c_s}} t. \quad (2.42)$$

FIG. 2.4 – Évolution de la température de surface, $\phi_e(t)$ variable

On remarque que la solution analytique (2.42) proposée par Lengellé pour un flux de chaleur constant et notre approximation de $T_s(t)$ par (2.30) lorsqu'on suppose $\phi_e(t)$ constant sont très proches. En effet, l'erreur entre les deux fonctions s'exprime

$$T_s^*(t) - T_s(t) = \frac{\phi_e}{\lambda_s} \sqrt{\frac{\lambda_s t}{\rho_s c_s}} \left(\sqrt{\frac{4}{\pi}} - \sqrt{\frac{p+1}{p}} \right). \quad (2.43)$$

On minimise l'erreur en résolvant

$$\sqrt{\frac{4}{\pi}} - \sqrt{\frac{p+1}{p}} = 0, \quad (2.44)$$

ce qui nous donne

$$p = \frac{\pi}{4 - \pi} \simeq 3.65979. \quad (2.45)$$

Par conséquent, comme $p \in \mathbb{N}$, le choix optimal de p dans le cas d'un flux constant serait $p = 4$. Le choix d'un polynôme de degré 4 dans le cas d'un flux de chaleur variable est donc compatible avec ces nouveaux résultats.

2.2 Vers un nouveau critère d'allumage

La plupart des codes de balistique intérieure considère que la combustion (c'est-à-dire le transfert de masse de la phase solide vers la phase gazeuse s'accompagnant d'une réaction exothermique) commence lorsque la température de surface des grains de poudre atteint une certaine température empirique d'allumage. Le plus délicat est de déterminer cette température. En général, les méthodes expérimentales utilisées ne reproduisent pas les conditions réelles d'utilisation. Or il est clairement établi que la température de surface lors de l'allumage

dépend fortement du flux de chaleur reçu, comme le montre une synthèse de mesures (figure 2.5) de températures et de délais d'allumage de diverses équipes présentée dans [LBDA91].

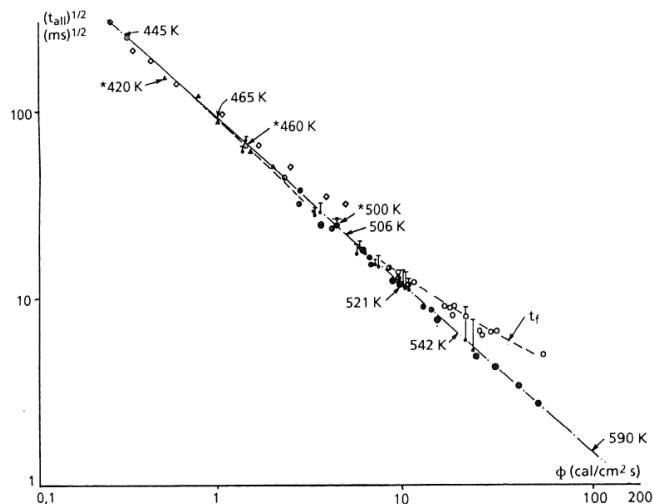


FIG. 2.5 – Températures et délais d'allumage en fonction d'un flux de chaleur extérieur constant

Ces mesures représentent la réponse d'un propergol solide soumis à un flux de chaleur constant (délivré par un laser). Les travaux théoriques et expérimentaux de Lengellé et son équipe sur la combustion de propergols solides [LBDA91] nous ont amenés à adapter leur critère d'allumage aux cas rencontrés en balistique intérieure. En comparant l'énergie dégagée par la réaction de décomposition du matériau énergétique à celle apportée par le flux de chaleur extérieur, on obtient un critère d'allumage qui permet de reproduire les délais d'allumage de façon quantitative. Ce modèle pourra donc reproduire des effets (variation du flux de chaleur, paramètres chimiques des poudres) qui ne peuvent être simulés par l'ancien critère.

Après une brève description du critère d'allumage, dans laquelle nous verrons qu'il est nécessaire de connaître le profil de température dans le solide, nous exposerons une méthode d'approximation du profil avec une forme exponentielle. Le couplage de ce profil au calcul de la température de surface à l'aide de polynômes décrit précédemment nous donne ainsi un algorithme rapide et efficace. Des simulations seront comparées aux résultats de la figure 2.5 et de la littérature.

2.2.1 Description

On considère que la décomposition du matériau énergétique est décrite par une réaction d'ordre zéro, c'est-à-dire que le taux de réaction est indépendant de la concentration en espèce chimique réactive. Cette hypothèse est justifiée dans la littérature [Len70],[BS95],[JMB04]. Le

taux de réaction $\omega_s(x, t)$ s'écrit donc

$$\omega_s(x, t) = A_s \rho_s \exp\left(-\frac{E_s}{R_u T(x, t)}\right), \quad (2.46)$$

avec A_s le facteur préexponentiel, E_s l'énergie d'activation et R_u la constante universelle des gaz. On considère maintenant l'équation complète (2.2) qu'on rappelle ici

$$\rho_s c_s \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \lambda_s \Delta T(x, t) + \omega_s(x, t) Q_{ex, s}.$$

Lorsque l'on s'approche du point d'allumage, le taux de réaction $\omega_s(x, t)$ croît rapidement. Le dégagement d'énergie dû à la combustion, négligeable pendant la phase d'échauffement, devient donc subitement important.

L'idée est de comparer, en sommant sur l'épaisseur de réaction $e_r(t)$, le terme transitoire de l'équation (2.2), qui représente l'effet lié à l'apport d'énergie par le flux extérieur, au terme de dégagement d'énergie dû à la réaction de décomposition, dont l'énergie chimique est notée $Q_{ex, s}$ qui s'exprime

$$\omega_s(x, t) Q_{ex, s} = A_s Q_{ex, s} \rho_s \exp\left(-\frac{E_s}{R_u T(x, t)}\right). \quad (2.47)$$

Dans un premier temps, on évalue l'épaisseur de réaction. La profondeur limite est atteinte lorsque la vitesse de réaction $\omega_s(e_r(t), t)$ devient négligeable par rapport à la vitesse superficielle $\omega_s(0, t)$, c'est-à-dire que

$$\frac{\omega_s(e_r(t), t)}{\omega_s(0, t)} = \frac{1}{10}, \quad (2.48)$$

où la fraction $\frac{1}{10}$ est choisie arbitrairement. Le température limite $T_{\text{lim}}(t) = T(e_r(t), t)$ est donnée par

$$\frac{\exp(-E_s/R_u T_{\text{lim}}(t))}{\exp(-E_s/R_u T_s(t))} = \frac{1}{10}. \quad (2.49)$$

On obtient donc l'expression directe de $T_{\text{lim}}(t)$ par

$$T_{\text{lim}}(t) = \frac{E_s T_s(t)}{E_s + R_u T_s(t) \ln(10)}, \quad (2.50)$$

et on peut alors chercher numériquement la valeur de $e_r(t)$.

Pour que se produise l'allumage, il faut que la chaleur dégagée par la réaction exothermique devienne non négligeable par rapport à l'énergie du flux de chaleur absorbé par le solide. Mathématiquement le nouveau critère d'allumage se traduit par

$$\int_0^{e_r(t)} \rho_s Q_{ex, s} A_s \exp(-E_s/R_u T(x, t)) dx \geq \varepsilon \int_0^{e_r(t)} \rho_s c_s \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} dx, \quad (2.51)$$

où ε est une fraction qui dépend de type de matériau énergétique. Pour les propergols composites, Lengellé établit à partir de mesures expérimentales que $\varepsilon = 0.15$, mais nous constaterons

plus tard que cette fraction n'est pas à déterminer précisément.

Ce critère d'allumage nécessite de connaître le profil de température dans le solide. La formulation par un profil polynômial (2.18) utilisée pour calculer la température de surface dans la section précédente n'est pas pratique. La profondeur de l'onde thermique est difficile à déterminer, même avec les conditions aux limites. Nous allons donc exposer une méthode rapide et précise basée sur l'hypothèse d'un profil exponentiel.

2.2.2 Calcul du profil exponentiel

Il nous reste encore à déterminer le profil de température dans le solide, disponible pour l'algorithme de différences finies mais inconnu lors du calcul de $T_s(t)$ par (2.30). En effet, avec l'hypothèse (2.18) d'un profil défini par morceaux par un polynôme et une fonction constante, il n'y a pas de calcul explicite de $B(t)$ et de δ . On cherche donc à décrire le profil de température par une autre fonction définie, continue et dérivable sur $[-r_e; 0]$.

On propose de choisir une fonction exponentielle qui s'écrit

$$T(x, t) = a(t) + b(t) \exp\left(\frac{x}{c(t)}\right), \quad (2.52)$$

où $a(t)$, $b(t)$ et $c(t)$ sont des fonctions uniquement du temps, inconnues pour l'instant. Il s'agit donc de déterminer ces trois fonctions afin d'approcher au mieux le profil de température.

On rappelle les deux conditions aux limites sur $T(x, t)$ déjà évoquées dans (2.4) page 28

$$T(-\infty, t) = T_0, \quad (2.53a)$$

$$-\frac{\partial T}{\partial x} + \phi_e(t) = 0. \quad (2.53b)$$

Comme la profondeur de l'onde thermique δ est très petite devant le rayon de la particule r_e , les effets de bords au centre du grain peuvent être négligés, c'est pourquoi on remplace

$$T(-\infty, t) = T_0 \quad \text{par} \quad T(-r_e, t) = T_0, \quad (2.54)$$

ce qui donne

$$a(t) + b(t) \exp\left(-\frac{r_e}{c(t)}\right) = T_0. \quad (2.55)$$

La condition à l'interface solide-gaz (2.53b) nous donne une deuxième équation qui s'écrit

$$a(t) + b(t) = T_s(t). \quad (2.56)$$

À ce stade, nous avons deux équations pour trois inconnues. Il nous reste à déterminer une troisième équation pour clore le système. Deux possibilités s'offrent à nous :

1. on considère que le gradient de la température à la surface peut être approché par la condition de Robin

$$\lambda_s \left. \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0^-} = \phi_e(t), \quad (2.57)$$

ce qui revient à écrire pour notre profil exponentiel

$$\frac{b(t)}{c(t)} = \frac{\phi_e(t)}{\lambda_s}. \quad (2.58)$$

On peut donc résoudre numériquement le système d'équations non linéaires (2.55), (2.56) et (2.58) par une méthode de Newton qui converge en pratique sans problème.

Remarque 6: Si on exprime $a(t)$ et $c(t)$ en fonction de $b(t)$, on trouve l'équation en $b(t)$

$$b(t) \left(1 - \exp \left(-\frac{r_e \phi_e(t)}{\lambda_s b(t)} \right) \right) = T_s - T_0. \quad (2.59)$$

On peut trouver une solution analytique à l'équation (2.59) en utilisant des développements en série de Lagrange [Die68], [CJ59] qui s'écrit

$$b(t) = \frac{T_s(t) - T_0}{1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{n r_e \phi_e(t)}{\lambda_s (T_s(t) - T_0)} \right)^{n-1} \exp \left(-\frac{n r_e \phi_e(t)}{\lambda_s (T_s(t) - T_0)} \right)}. \quad (2.60)$$

2. on veut que l'énergie absorbée $Q_s(t)$ calculée par (2.19) à la page 31, qui s'écrit

$$Q_s = \int_{-r_e}^0 \rho_s c_s (T(x, t) - T_0) dx, \quad (2.61)$$

soit la même que pour notre profil exponentiel. On peut donc réécrire cette équation avec notre formulation exponentielle de $T(x, t)$, et on obtient

$$Q_s(t) = \rho_s c_s \left[b(t) c(t) \left(1 - \exp \left(-\frac{r_e}{c(t)} \right) \right) + (a(t) - T_0) r_e \right]. \quad (2.62)$$

$Q_s(t)$ étant connue, on a donc notre système de trois équations à trois inconnues. Comme précédemment, on résout alors numériquement le système (2.55), (2.56) et (2.62).

On compare les résultats à ceux obtenus par la méthode des différences finies. On se place dans le cas test précédent avec un gaz à 2000 K. Les deux approximations sont correctes d'après la figure 2.6, même si la deuxième méthode paraît un peu plus précise (en considérant que les différences finies nous donnent la solution de référence). Nous verrons par la suite que le choix de la troisième équation n'a pas d'influence sur les délais d'allumage.

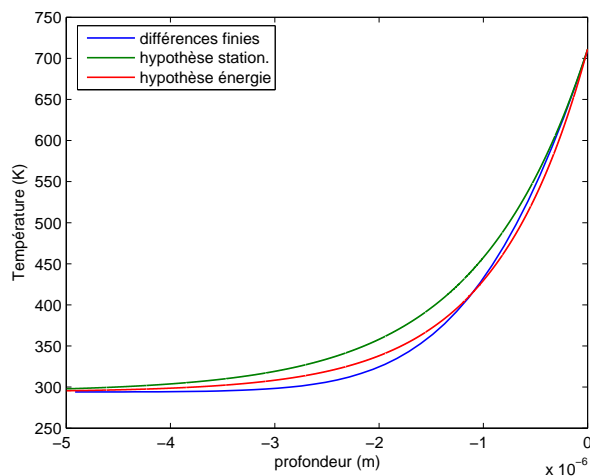


FIG. 2.6 – Profil de température dans le solide

2.2.3 Premières validations

On valide le critère d'allumage à partir de résultats expérimentaux de plusieurs équipes ([TS70], [PBHF64], [NTI79]) dont la synthèse est faite dans [LBDA91] qui est rappelée page 38 figure 2.5. On soumet un grain de nitrocellulose à plusieurs flux de chaleur constants. On utilise les données du tableau 2.2 issues de [LBDA91].

ρ_s	$1.6 \cdot 10^6 \text{ g.m}^{-3}$
c_s	$1.67 \text{ J.g}^{-1}.\text{K}^{-1}$
λ_s	$21.35 \cdot 10^{-2} \text{ J.m}^{-1}.\text{s}^{-1}.\text{K}^{-1}$
E_s	$167.5 \text{ kJ.mol}^{-1}$
A_s	$1 \cdot 10^{17} \text{ s}^{-1}$
$Q_{ex,s}$	251.2 J.g^{-1}
r_0	$5.715 \cdot 10^{-3} \text{ m}$
T_0	300 K

TAB. 2.2 – Données thermodynamiques du matériau énergétique

Remarque 7: Les caractéristiques de la réaction de décomposition E_s et A_s sont données dans [LBDT84]. E_s désigne l'énergie d'activation et A_s le facteur pré-exponentiel associé à la réaction de décomposition en phase solide. Ces deux paramètres sont délicats à déterminer. La littérature fournit des données plus ou moins cohérentes. Les principales méthodes expérimentales utilisées, thermogravimétrie ou analyse thermique différentielle, sont exposées par Ozawa [Oza65] et Kissinger [Kis57]. Le procédé de mesures est complexe et le dépouillement des résultats est difficile. La détermination des caractéristiques d'une poudre utilisée par les moyens opérationnels est en cours dans nos laboratoires.

La première étape de validation consiste à comparer les résultats de l'allumage par l'algorithme de différences finies à ceux proposés dans la littérature. Le tableau 2.3 résume les résultats des mesures de température d'allumage T_{all} et de délai d'allumage t_{all} pour différentes intensités de flux de chaleur ([LBDA91], figure 2.5 page 38).

ϕ_{all} ($kW.m^{-2}$)	t_{all} exp. (ms)	t_{all} simulé (ms)	T_{all} exp. (K)	T_{all} simulé (K)
4186.8	2.2	2.2	590	592
891.8	34.	33.6	542	546
456.4	115	111		528
418.7	132	129	521	525
184.2	550	550	500	505

TAB. 2.3 – Comparaison simulations/expériences

Les délais d'allumage obtenus par simulation sont proches de ceux mesurés. La dépendance de la température d'allumage au flux de chaleur est bien reproduite, ce qui n'était pas le cas pour les anciens critères d'allumage. Notre critère d'allumage (2.51) est donc validé sur un cas simple.

Remarque 8: Les résultats expérimentaux présentés dans le tableau 2.3 font intervenir un transfert d'énergie par un flux de chaleur issu d'un laser. Nous sommes conscients que le mécanisme de transfert de chaleur radiatif est très différent du transfert de chaleur convectif rencontré dans les problèmes de balistique intérieure. Cependant, notre modèle considère le cas général d'un flux extérieur $\phi_e(t)$ quelconque, sans faire d'hypothèse sur la nature de ce flux.

Remarque 9: Il est pour l'instant impossible de quantifier précisément le coefficient de transfert thermique convectif et donc le flux de chaleur convectif entre un grain de poudre et un écoulement de gaz chaud. Dans le cadre de l'arrangement technique trinational sur l'étude des phénomènes d'allumage, des techniques de mesures sont en train d'être mises au point. Des résultats expérimentaux similaires à ceux proposés dans le tableau 2.3 seront donc peut-être disponibles ultérieurement.

On veut valider pas à pas notre algorithme complet qui se compose

1. de l'approximation du profil de température par un polynôme, qui permet de calculer l'évolution de la température de surface donnée par (2.30) ;
2. de l'approximation du profil de température par une fonction exponentielle pour évaluer les intégrales du critère d'allumage décrit par (2.51).

Nous simulons dans un premier temps les mêmes cas que dans le tableau 2.3, mais en utilisant non plus la méthode des différences finies pour évaluer le profil de la température dans le critère d'allumage, mais notre hypothèse sur le profil exponentiel. Nous validerons ainsi le bien-fondé

de la formulation (2.52). La température de surface $T_s(t)$ est donc toujours calculée par la méthode des différences finies, mais la température $T(x, t)$ est remplacée par la formule (2.52), c'est-à-dire par

$$T(x, t) = a(t) + b(t) \exp\left(\frac{x}{c(t)}\right),$$

dans les intégrales de notre critère d'allumage (2.51) rappelé ici

$$\int_0^{e_r(t)} \rho_s Q_{ex,s} A_s \exp(-E_s/R_u T(x, t)) dx \geq \varepsilon \int_0^{e_r(t)} \rho_s c_s \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} dx.$$

Les résultats des simulations sont identiques à ceux proposés dans le tableau 2.3 quelle que soit la méthode utilisée. Cela s'explique par le fait que l'épaisseur de la zone de réaction est très mince (de l'ordre de 10^{-7} m). Comme les gradients de température à la surface sont quasiment égaux, on a donc la même intégrale sur la zone de réaction.

Il reste encore à vérifier que l'approximation du calcul de la température de surface par

$$T_s(t) = T_0 + \sqrt{\frac{p+1}{p} \frac{\phi_e(t) Q_s}{\lambda_s \rho_s c_s}}$$

couplée à l'évaluation du profil de $T(x, t)$ par (2.52), donne des résultats précis.

$\phi_{all} (kW.m^{-2})$	4186.8	891.8	456.4	418.7
T_{all} expérimentale (K)	590	542		521
T_{all} approchée (K)	591	545	526	524
t_{all} expérimental (ms)	2.2	34.	115.	132.
t_{all} approché (ms)	2.3	35.8	117.4	136.8

TAB. 2.4 – Comparaison du modèle approché aux expériences

Les délais et températures d'allumage sont légèrement surestimés. Mais l'erreur entre expérience et calcul est négligeable comparée aux imprécisions des données du matériau énergétique et des mesures expérimentales.

Remarque 10: La fraction d'énergie ε de notre critère d'allumage, dépendante du matériau énergétique, n'est pas à connaître précisément. Le terme exponentiel de la partie gauche de l'inéquation (2.51) augmente très rapidement lorsque l'on s'approche de l'allumage. Ainsi, une surestimation de ε n'a pas de fortes conséquences sur la qualité des résultats. Par exemple, pour le cas $\phi_e = 4186.8 kW.m^{-2}$, lorsque la valeur de ε est doublée, la différence de résultats n'est que de 8 %.

2.2.4 Conclusions

Nous disposons maintenant d'un critère d'allumage plus réaliste qui reproduit correctement les délais d'allumage pour des cas simples. D'autres tests présentés ultérieurement pour des cas de balistique intérieure étoufferont la validation de ce critère.

Le couplage de notre critère à des hypothèses sur le profil de température dans le grain est concluant. Nous obtenons des résultats précis pour un algorithme beaucoup plus léger (en temps de calcul et en espace mémoire).

Notre but est donc atteint : cette méthode pourra être implémentée dans un code de balistique intérieure sans ralentir de façon significative son exécution.

2.3 Combustion à basse pression

La loi de Vieille [Vie93], qui relie la vitesse de combustion u_s à la pression P par la formule

$$u_s = a_n P^n, \quad (2.63)$$

avec a_n et n des constantes empiriques, et très répandue dans la communauté de la combustion, est établie pour des pressions se situant entre 30 MPa et 500 MPa, alors que les pressions rencontrées dans les problèmes de balistique intérieure s'étendent plutôt de 0.5 MPa à 700 MPa. Son extrapolation aux basses pressions laisse donc un doute sur la pertinence des résultats. Lorsque la pression augmente, l'influence de la température ambiante sur la vitesse de combustion devient négligeable, et seule la pression agit sur cette vitesse. La loi de Vieille est alors bien vérifiée. Pour des pressions très élevées, il y a d'autres phénomènes encore inconnus qui jouent un rôle dans la combustion, d'où la limite supérieure de la loi de Vieille. Mais pour des pressions peu élevées, la vitesse de combustion dépend fortement de la température ambiante. Les modèles devront donc tenir compte de cette température pour rendre compte du phénomène.

L'idée, adaptée des travaux de Weber et *al.* ([JMB04], [WBT05]), est de coupler les équations de la phase solide aux équations qui décrivent la phase gazeuse afin d'avoir une influence directe de la température des gaz. Nous sommes donc alors en présence d'un système de quatre équations : les équations de la chaleur pour les deux phases et les équations de transport des fractions massiques des espèces chimiques inertes (pour la phase solide) et réactives (pour la phase gazeuse). Grâce à une hypothèse sur les phénomènes en phase gazeuse détaillée plus loin, on intègre un modèle grossier de cinétique chimique, tenant compte d'une réaction de décomposition en phase solide et d'une réaction chimique en phase gazeuse. Cette simplification est radicale, car les réactions chimiques dans les phénomènes de combustion mettent en jeu plusieurs dizaines d'espèces chimiques réagissant dans des centaines de réactions en parallèle. Une fois que la combustion démarre, une flamme s'établit à l'interface et se propage dans la phase gazeuse. Plusieurs modèles existent et nous retenons un modèle de flamme épaisse, en supposant une énergie d'activation très faible pour la réaction globale en phase gazeuse. Enfin, grâce aux bilans à l'interface et aux conditions aux limites, nous obtenons un modèle

simplifié de combustion à basse pression.

Il est à noter que la difficulté du problème réside aussi bien dans l'établissement des équations du modèle que dans sa validation. Les données complètes des matériaux énergétiques sont très difficiles à déterminer, en particulier le facteur pré-exponentiel et l'énergie d'activation pour la réaction globale en phase gazeuse. La littérature fournit quelques données sur certains matériaux mais sont peu cohérentes entre elles. Ne disposant pas de ces données pour nos poudres (des essais sont en cours), nous nous contenterons de celles trouvées dans la bibliographie. De plus, les mesures expérimentales de températures de surface et de vitesse de combustion sont très délicates à réaliser et très limitées. Dans le cas de la combustion très vive des poudres rencontré en balistique intérieure, les outils classiques de mesures ne conviennent pas. À tous ces problèmes expérimentaux s'ajoute l'impossibilité de quantifier correctement les transferts thermiques entre le grain et le gaz. C'est pourquoi la validation de notre modèle restera qualitative, par manque de mesures expérimentales de vitesse de combustion et de température de surface correspondant aux matériaux énergétiques étudiés.

2.3.1 Équations des phases

Le problème unidimensionnel est illustré par la figure 2.7. Lors de la combustion, la surface de combustion est décomposée en gaz. L'interface doit donc se déplacer dans le solide, c'est-à-dire dans le sens des x négatifs. Pour simplifier les calculs, l'interface est supposée fixe à $x = 0$. Le changement de référentiel nécessite donc l'ajout d'un terme dans les équations des phases. Ce terme traduit le fait qu'un flux de masse $m = \rho_s u_s = \rho_g u_g$ se déplace vers l'interface, dans le sens des x positifs pour le solide, négatifs pour le gaz.

L'indice g correspond à la phase gazeuse et s à la phase solide. Dans un souci de clarté, on rappelle les notations : λ_k est la conductivité thermique (supposée maintenant constante) de la phase k , ρ_k sa masse volumique, u_k sa vitesse normale à l'interface, $Q_{ex,k}$ sa chaleur dégagée et ω_k son taux de production de la réaction. c_s est la chaleur spécifique du solide et $c_{p,g}$ la chaleur spécifique à pression constante du gaz. La combustion correspond à la dégradation du solide en gaz au travers d'une réaction exothermique. Y et T sont respectivement la fraction massique de solide non décomposé et la température du solide tandis que Y_g et T_g sont respectivement la fraction massique d'espèces réactives et la température dans le gaz. La phase solide, considérée comme chimiquement inerte excepté à la surface, est décrite par

$$\rho_s c_s \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} + \rho_s c_s u_s \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} = \lambda_s \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} + \Omega_s Q_{ex,s}, \quad (2.64)$$

$$\rho_s \frac{\partial Y(x,t)}{\partial t} + \rho_s u_s \frac{\partial Y(x,t)}{\partial x} = -\Omega_s, \quad (2.65)$$

avec $x \leq 0$, et on suppose qu'une flamme prémélangée issue de la décomposition du matériau énergétique s'établit de façon stationnaire dans la phase gazeuse. Dans notre cas, on peut parler de flamme prémélangée car les espèces réactives résultant de la décomposition du solide en gaz à la surface sont considérées comme parfaitement mélangées. L'hypothèse d'un comportement stationnaire de la phase gazeuse est justifiée par Brewster dans [BS95], d'où

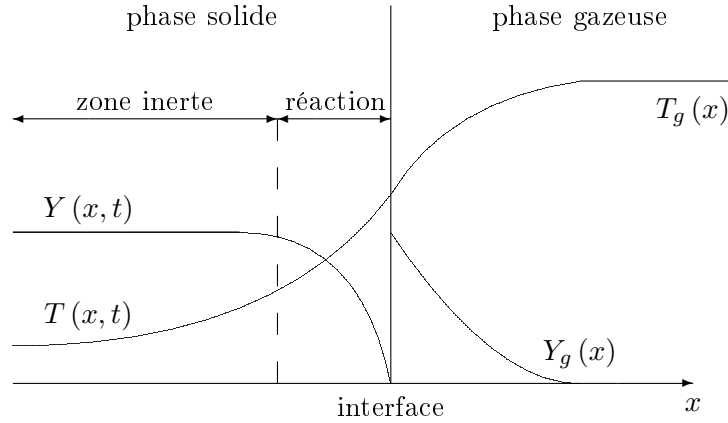


FIG. 2.7 – Schéma des phases dans la configuration choisie

les équations

$$\lambda_g \frac{d^2 T_g(x)}{dx^2} - \rho_g c_{p,g} u_g \frac{dT_g(x)}{dx} = -\Omega_g Q_{ex,g}, \quad (2.66)$$

$$\frac{\lambda_g}{c_{p,g} Le} \frac{d^2 Y_g(x)}{dx^2} - \rho_g u_g \frac{dY_g(x)}{dx} = \Omega_g, \quad (2.67)$$

pour $x \geq 0$. Le nombre de Lewis qui compare la vitesse de diffusion de la chaleur à celle des espèces chimiques est une variable importante. Il est noté Le . En pratique on peut supposer que $Le = 1$, hypothèse fréquemment utilisée qu'on retrouve dans les ouvrages de Williams [Wil85] ou plus récemment chez Poinot et Veynante [PV05] ou Giovangigli [Gio99].

On suppose que les réactions sont unimoléculaires, c'est-à-dire que



où $R(s)$ est l'espèce réactive en phase solide, $R(g)$ l'espèce réactive décomposée en gaz et $M(g)$ le produit de la réaction. On suppose que les réactions globales suivent une loi d'Arrhenius de la forme

$$k_s = A_s \exp\left(-\frac{E_s}{R_u T}\right), \quad (2.69a)$$

$$k_g = A_g \exp\left(-\frac{E_g}{R_u T_g}\right), \quad (2.69b)$$

et on note τ_k l'ordre de la réaction. Cet ordre de réaction décrit l'évolution des concentrations des espèces chimiques au cours du temps. Les taux de production s'expriment alors

$$\omega_s = \rho_s Y^{\tau_s} k_s = \rho_s A_s Y^{\tau_s} \exp\left(-\frac{E_s}{R_u T}\right), \quad (2.70a)$$

$$\omega_g = Y_g P^{\tau_g} k_g = A_g Y_g P^{\tau_g} \exp\left(-\frac{E_g}{R_u T_g}\right), \quad (2.70b)$$

avec P la pression du gaz, A_k et E_k le facteur préexponentiel et l'énergie d'activation.

Remarque 11: En général, les réactions unimoléculaires sont d'ordre un [WMD06], car si la concentration de l'espèce réactive est doublée, le taux de réaction est également doublé. Du fait du profil très raide de $Y(x, t)$ dans le solide, on peut cependant utiliser l'hypothèse classique d'une réaction d'ordre zéro pour la réaction de décomposition du solide en gaz, qui ne pénalise pas la précision des résultats tout en simplifiant les modèles ([BS95], [Len70]).

Remarque 12: Nous supposons que la réaction globale en phase gazeuse est d'ordre deux. Cette hypothèse est justifiée dans [WSB98b] et [WSB98a] par le fait que la réaction globale représente plusieurs réactions élémentaires en parallèle.

2.3.2 Conditions aux limites

Dans la phase solide, les mêmes hypothèses sont faites pour la température. Concernant la fraction massique, on considère que tout est décomposé à la surface. Les conditions aux limites s'expriment donc

$$T(-\infty, t) = T_0, \quad (2.71a)$$

$$T(0^-, t) = T_s(t), \quad (2.71b)$$

$$Y(-\infty, t) = 1, \quad (2.71c)$$

$$Y(0^-, t) = 0. \quad (2.71d)$$

Pour la phase gazeuse, on fait l'hypothèse que toutes les espèces issues de la décomposition du solide sont réactives et qu'elles sont totalement consommées à l'infini. On introduit T_∞ la température de flamme qui s'établit loin de la surface et $T_{s,g}$ la température à la surface vue de la phase gazeuse. On écrit

$$T_g(+\infty, t) = T_\infty, \quad (2.72a)$$

$$T_g(0^+, t) = T_{s,g}(t), \quad (2.72b)$$

$$Y_g(+\infty, t) = 0, \quad (2.72c)$$

$$Y_g(0^+, t) = 1. \quad (2.72d)$$

2.3.3 Bilans à l'interface

En considérant qu'il y a conservation de la masse, le bilan de masse donne

$$\rho_s u_s = \rho_g u_g = m. \quad (2.73)$$

L'hypothèse que toutes les espèces décomposées sont réactives pour la réaction en phase gazeuse permet d'écrire le bilan des espèces

$$m = m Y_g|_{0^+} - \frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \frac{dY_g}{dx} \Big|_{0^+}. \quad (2.74)$$

La continuité de la température à l'interface s'écrit

$$T(0^-, t) = T_g(0^+, t), \quad (2.75)$$

soit

$$T_s(t) = T_{s,g}(t). \quad (2.76)$$

Enfin, l'équation de bilan d'énergie à l'interface fait intervenir le flux de chaleur issu de l'établissement de la flamme, ce qui nous donne

$$\rho_s c_s V \frac{\partial T}{\partial t} = A_{\text{ext}} (\Lambda_g + \phi_e(t)) + A_{\text{int}} \Lambda_s, \quad (2.77)$$

où on pose

$$\Lambda_s = \lambda_s \left. \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0^-}, \quad (2.78)$$

$$\Lambda_g = \lambda_g \left. \frac{dT_g(x)}{dx} \right|_{x=0^+}. \quad (2.79)$$

2.3.4 Développements du modèle

On cherche maintenant une expression analytique de $Y_g(x)$ et $T_g(x)$ à partir des équations (2.66), (2.67) de la phase gazeuse. L'hypothèse classique $Le = 1$ est adoptée, ainsi que l'égalité des chaleurs massiques $c_{p,g} = c_s = c_p$.

De nombreux modèles de flamme existent pour décrire la répartition des zones de convection-diffusion (zones d'échauffement des gaz réactifs) et des zones de diffusion-réaction (zone de réaction), en raisonnant en général sur l'énergie d'activation de la réaction globale en phase gazeuse E_g . Il n'est bien entendu pas possible de tous les traiter.

Le modèle de Denison, Baum et Williams (DBW) ([DB61], [Wil73], [Wil85]) suppose une énergie de réaction très grande, qui correspond à la description d'une flamme mince.

Une approche similaire est proposée dans le modèle de Beckstead, Derr et Price (BDP) ([BDP70], [BDP71]) mais avec une modélisation plus empirique, qui divise la zone de flamme en deux, une de préchauffage et une de réaction.

Un modèle de flamme épaisse est proposé initialement par Ward, Son et Brewster (WSB) ([BWS97], [WSB97], [WSB98b]) en supposant E_g très faible. La flamme devient donc attachée à la surface du solide, et les deux zones initiales se confondent en une zone de convection-diffusion-réaction.

Enfin l'équipe de Lengellé à l'ONERA propose un modèle qui tient compte du profil exponentiel concave observé expérimentalement dans la structure des flammes, sans faire d'hypothèse sur la valeur de l'énergie d'activation. Établi par Lengellé [LDGT91], ce modèle est par la

suite développé afin de reproduire le profil observé [BDL96], [LDT00].

Nous utiliserons la même approche que pour le modèle WSB et ses développements [JBH00], [JMB04], [WBT05] dont nous nous inspirons. Nous considérons donc des flammes épaisses, en considérant que l'énergie d'activation de la réaction globale en phase gazeuse est nulle

$$E_g = 0. \quad (2.80)$$

On considère le système d'équations (2.66), (2.67). En multipliant la seconde équation par $Q_{ex,g}$ et en l'additionnant à la première, on obtient

$$\frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \left(c_{p,g} \frac{d^2 T_g}{dx^2} + Q_{ex,g} \frac{d^2 Y_g}{dx^2} \right) - \rho_g u_g \left(c_{p,g} \frac{dT_g}{dx} + Q_{ex,g} \frac{dY_g}{dx} \right) = 0. \quad (2.81)$$

En posant

$$Z = c_{p,g} \frac{dT_g}{dx} + Q_{ex,g} \frac{dY_g}{dx}, \quad (2.82)$$

on obtient une équation différentielle ordinaire en Z

$$\frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \frac{dZ}{dx} - \rho_g u_g Z = 0. \quad (2.83)$$

La résolution donne l'expression de Z qui s'écrit

$$Z = C_1 \exp \left(\frac{\rho_g u_g c_{p,g}}{\lambda_g} x \right) \quad (2.84)$$

avec C_1 une constante d'intégration, et en intégrant (2.82)

$$c_{p,g} T_g + Q_{ex,g} Y_g = C_1 \frac{\lambda_g}{\rho_g u_g c_{p,g}} \exp \left(\frac{\rho_g u_g c_{p,g}}{\lambda_g} x \right) + C_2, \quad (2.85)$$

C_2 étant une deuxième constante d'intégration. En utilisant les conditions aux limites

$$Y_g(+\infty) = 0, \quad T_g(+\infty) = T_\infty, \quad (2.86)$$

on obtient

$$C_1 = 0, \quad C_2 = c_{p,g} T_\infty. \quad (2.87)$$

On en déduit alors l'expression de $Y_g(x)$ en fonction de $T_g(x)$, soit

$$Y_g(x) = \frac{c_{p,g}}{Q_{ex,g}} (T_\infty - T_g(x)). \quad (2.88)$$

On remplace alors $Y_g(x)$ par (2.88) dans (2.66), ce qui nous donne une nouvelle équation différentielle qui s'écrit

$$\lambda_g \frac{d^2 T_g}{dx^2} - \rho_g u_g c_{p,g} \frac{dT_g}{dx} - P^{\tau_g} k_g c_{p,g} T_g = -P^{\tau_g} k_g c_{p,g} T_\infty. \quad (2.89)$$

L'ordre de la réaction en phase gazeuse est supposé égal à deux, c'est-à-dire $\tau_g = 2$. La résolution de l'équation sans second membre nous donne

$$T_g(x) = C_+ \exp(r_+ x) + C_- \exp(r_- x), \quad (2.90)$$

avec C_+ et C_- les constantes d'intégration et

$$r_{\pm} = \frac{1}{2\lambda_g} \left(\rho_g u_g c_{p,g} \pm \sqrt{(\rho_g u_g c_{p,g})^2 + 4\lambda_g c_{p,g} P^2 k_g} \right). \quad (2.91)$$

La solution particulière s'écrit

$$T_g(x) = T_{\infty}, \quad (2.92)$$

et on a donc

$$T_g(x) = C_+ \exp(r_+ x) + C_- \exp(r_- x) + T_{\infty}. \quad (2.93)$$

La condition à l'interface

$$T_g(0) = T_s \quad (2.94)$$

nous donne

$$C_+ + C_- + T_{\infty} = T_s, \quad (2.95)$$

et quand on associe la condition à l'infini

$$T_g(+\infty) = T_{\infty} \quad (2.96)$$

aux expressions des racines r_{\pm} , on obtient forcément

$$C_+ = 0 \quad (2.97)$$

car

$$r_+ > 0, \quad r_- < 0. \quad (2.98)$$

On en déduit alors l'expression de la température des gaz

$$T_g(x) = T_{\infty} + (T_s - T_{\infty}) \exp(ax), \quad (2.99)$$

avec

$$a = \frac{m c_{p,g} - \sqrt{m^2 c_{p,g}^2 + 4\lambda_g c_{p,g} P^2 k_g}}{2\lambda_g}, \quad (2.100)$$

et

$$m = \rho_g u_g. \quad (2.101)$$

Si on exprime l'équation de bilan de masse (2.74) à l'aide de (2.88) et (2.99), on peut écrire

$$m = m \frac{c_{p,g}}{Q_{ex,g}} (T_{\infty} - T_s) - \frac{\lambda_g}{Q_{ex,g}} (T_{\infty} - T_s) a \quad (2.102)$$

$$= \frac{(T_{\infty} - T_s)}{2Q_{ex,g}} \left(m c_{p,g} + \sqrt{m^2 c_{p,g}^2 + 4\lambda_g c_{p,g} P^2 k_g} \right) \quad (2.103)$$

d'où

$$\sqrt{m^2 c_{p,g}^2 + 4 \lambda_g c_{p,g} P^2 k_g} = m \left(\frac{2 Q_{ex,g}}{(T_\infty - T_s)} - c_{p,g} \right), \quad (2.104)$$

et on en déduit alors

$$m^2 = \frac{c_{p,g} \lambda_g P^2 k_g (T_\infty - T_s)^2}{Q_{ex,g} (Q_{ex,g} - c_{p,g} (T_\infty - T_s))}. \quad (2.105)$$

Le bilan d'énergie (2.77) fait intervenir le gradient de température du gaz près de la surface. Le développement de (2.66) avec les changements de variables

$$\Gamma = \lambda_g \frac{dT_g}{dx} = \lambda_g T_g' \quad (2.106)$$

$$\frac{u'}{u} = -\frac{m c_p}{\lambda_g} \quad (2.107)$$

donne

$$\Gamma' + \frac{u'}{u} \Gamma = -\omega_g Q_{ex,g} \quad (2.108)$$

et en intégrant sur l'intervalle $[0; +\infty[$, on obtient

$$\Lambda_g = \lambda_g \left. \frac{dT_g}{dx} \right|_{x=0^+} = \int_0^{+\infty} \omega_g Q_{ex,g} \exp\left(-\frac{m c_{p,g}}{\lambda_g} x\right) dx \quad (2.109)$$

En utilisant l'expression du taux de réaction (2.70b) et des expressions de Y_g (2.88) et T_g (2.99), on obtient l'expression

$$\Lambda_g = \frac{A_g c_{p,g} (T_\infty - T_s) P^2}{a'} \quad (2.110)$$

où

$$a' = \frac{m c_{p,g} + \sqrt{m^2 c_{p,g}^2 + 4 \lambda_g A_g c_{p,g} P^2}}{2 \lambda_g} \quad (2.111)$$

Avec (2.105), on peut exprimer Λ_g sous la forme

$$\Lambda_g = m Q_{ex,g} \left(1 - \frac{m c_{p,g}}{\lambda_g a'} \right) \quad (2.112)$$

On a donc exprimé Λ_g en fonction du flux de masse m . Il nous reste maintenant à calculer m à partir de $Y(x, t)$ et $T(x, t)$. On associe l'équation de transport (2.65) à la condition aux limites (2.71d), d'où

$$m \left. \frac{\partial Y(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0^-} = -\Omega_s \quad (2.113)$$

et comme le profil de $Y(x, t)$ est connu dans le solide, on peut donc en déduire la valeur du flux de masse m .

Connaissant les profils initiaux de $Y(x, t)$, $T(x, t)$, $Y_g(x)$ et $T_g(x)$, l'algorithme complet peut donc se résumer de la façon suivante :

1. calcul du flux de masse m à partir de l'équation (2.113) ;
2. calcul de a' par (2.111) ;
3. évaluation du gradient de température dans le gaz à l'interface Λ_g grâce à (2.112) ;
4. calcul de la température de surface T_s à l'aide du bilan d'énergie à l'interface (2.77) ;
5. méthode des différences finies pour calculer $Y(x, t)$ et $T(x, t)$ au pas de temps suivant.

Remarque 13: On peut aussi exprimer la température T_∞ . En combinant (2.110) et (2.112), on obtient

$$m Q_{ex,g} \left(1 - \frac{m c_{p,g}}{\lambda_g a'} \right) = \frac{k_g c_{p,g} P^2 (T_\infty - T_s)}{a'}, \quad (2.114)$$

qui conduit alors à

$$T_\infty = T_s + \frac{m Q_{ex,g}}{k_g c_{p,g} P^2} \left(a' - \frac{m c_{p,g}}{\lambda_g} \right). \quad (2.115)$$

En remarquant que

$$a' - \frac{m c_{p,g}}{\lambda_g} = a, \quad (2.116)$$

on écrit alors plus simplement

$$T_\infty = T_s + \frac{m Q_{ex,g} a}{k_g c_{p,g} P^2}. \quad (2.117)$$

Pour l'instant, notre méthode d'approximation du profil de la température à l'intérieur du solide par une fonction polynômiale n'est plus applicable à cause du terme de flux de masse. Nous utilisons alors la méthode des différences finies.

2.3.5 Résultats et commentaires

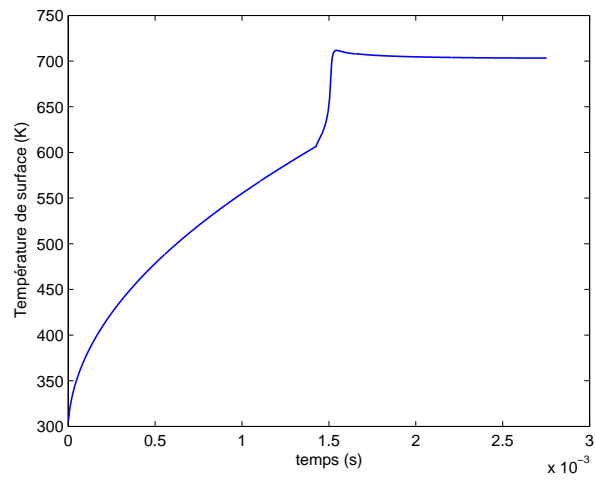
Comme expliqué précédemment, il est difficile de valider qualitativement le modèle en le comparant à des données expérimentales. Nous nous contenterons de montrer que le comportement du modèle correspond qualitativement aux observations expérimentales.

On utilise les données d'un propergol donné dans [JMB04] qu'on rappelle dans le tableau 2.5

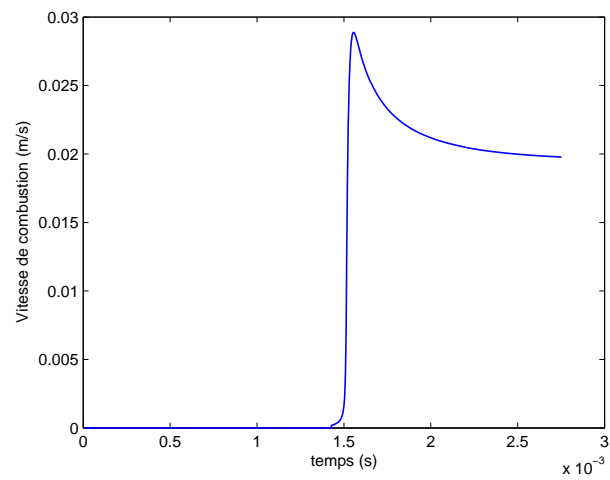
On applique au matériau un flux de chaleur constant $\phi_e = 4180 \text{ kW.m}^{-2}$. L'allumage a lieu à $t_{all} = 1.43 \text{ ms}$ pour une température de surface $T_{all} = 607 \text{ K}$.

La vitesse de combustion et la température de surface tendent vers une valeur stationnaire, ce qui est en accord avec la réalité. On veut vérifier maintenant que la vitesse de combustion tend vers une loi de Vieille [Vie93] de la forme

$$u_s = a_n P^n \quad (2.118)$$

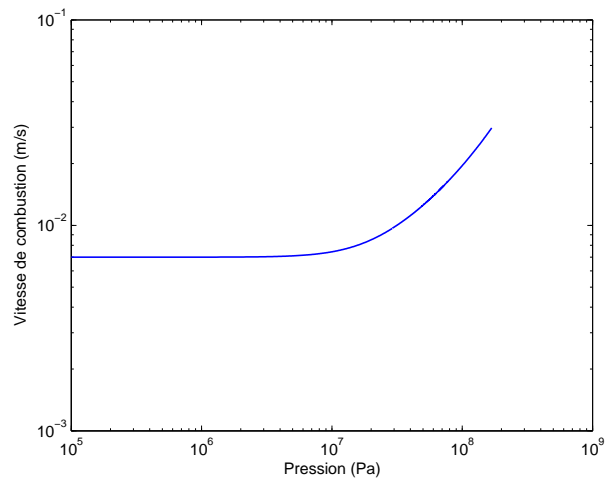
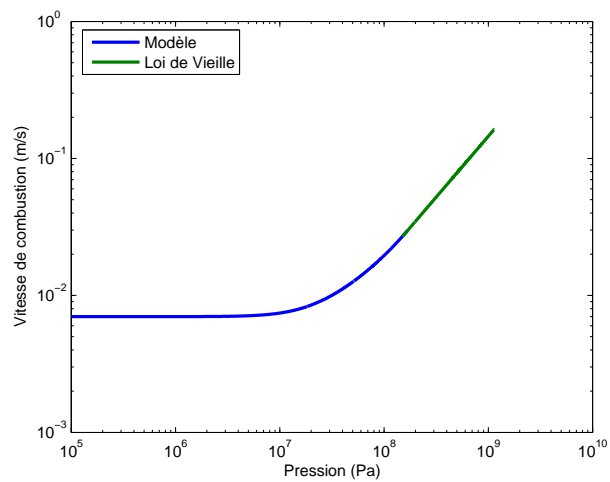


a - Température de surface



b - Vitesse de combustion

FIG. 2.8 – Évolution du solide au cours du temps

a - Évolution de u_s en fonction de P 

b - Extension par une loi de Vieille

FIG. 2.9 – Compatibilité du modèle avec une loi de Vieille

ρ_s	$1.6 \cdot 10^6 \text{ g.m}^{-3}$
c_p	$1.25604 \text{ J.g}^{-1}.\text{K}^{-1}$
λ_s	$16.077 \cdot 10^{-2} \text{ J.m}^{-1}.\text{s}^{-1}.\text{K}^{-1}$
A_s	$1 \cdot 10^{17} \text{ s}^{-1}$
E_s	$168.569 \text{ kJ.mol}^{-1}$
$Q_{ex,s}$	175.846 J.g^{-1}
λ_g	$8.37 \cdot 10^{-4} \text{ J.m}^{-1}.\text{s}^{-1}.\text{K}^{-1}$
A_g	$2.36 \cdot 10^{-5} \text{ g.m}^{-3}.\text{s}^{-1}.\text{Pa}^{-2}$
E_g	0 kJ.mol^{-1}
$Q_{ex,g}$	2336.23 J.g^{-1}
M_g	24 g.mol^{-1}
P	$1 \cdot 10^7 \text{ Pa}$
r_0	$5.715 \cdot 10^{-3} \text{ m}$
T_0	300 K

TAB. 2.5 – Données du solide

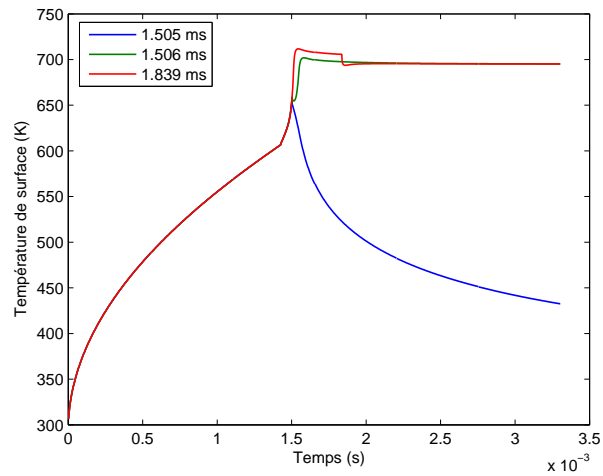
lorsque la pression de la chambre augmente. On fait donc varier la pression de 0.1 MPa à 170 MPa. La figure 2.9a illustre les résultats en échelle logarithmique.

Lorsque la pression approche de la limite basse du domaine de validité de la loi de Vieille (entre 150 et 200 MPa), la courbe peut être étendue par une droite dont les coefficients correspondent dans ce cas à $a_n = 1.445 \cdot 10^{-9}$ SI et $n = 0.89$, ce qui est conforme aux valeurs classiques. Nous ne disposons pas pour cette poudre de coefficients mesurés pour la loi de Vieille. Cependant, notre modèle réagit correctement à la variation de pression dans la chambre.

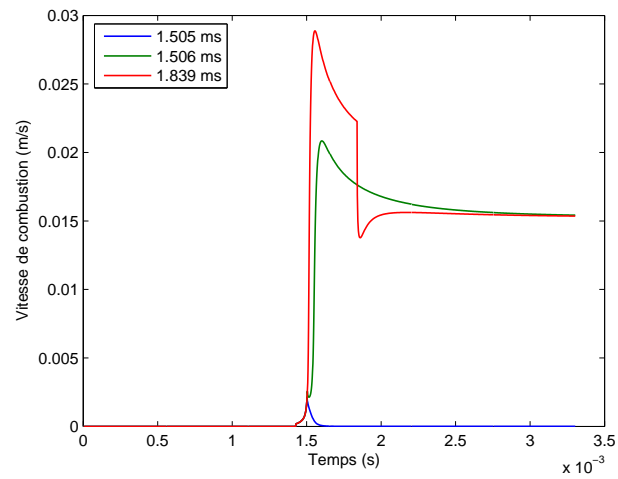
Enfin, on veut observer ce qu'il se passe lorsqu'on annule subitement le flux de chaleur extérieur. Concrètement, il s'agit du cas où l'allumeur cesse de débiter des gaz chauds. Si le grain n'est pas encore allumé, il ne doit pas y avoir d'établissement d'un régime de combustion stationnaire. Par contre, si le grain brûle lorsque le flux de chaleur est annulé, le régime stationnaire de combustion déjà établi ne doit pas disparaître.

Trois simulations sont effectuées dans lesquelles le flux de chaleur est brusquement annulé à différents temps (résultats dans la figure 2.10)

Un régime stationnaire s'établit lorsque l'interruption du flux de chaleur est réalisée après 1.505 ms. Notre critère d'allumage nous donnait un temps d'allumage de 1.43 ms qui correspond au temps pour lequel le dégagement d'énergie par décomposition du solide devient conséquent. Ces dernières simulations nous démontrent qu'il n'y a pas forcément à ce moment-là établissement d'une flamme qui, par transfert de chaleur de la flamme vers la surface, auto-alimente le processus de combustion.



a - Température de surface



b - Vitesse de combustion

FIG. 2.10 – Simulation d'allumage et d'extinction

2.4 Limites et approfondissements possibles

Le modèle de combustion à basse pression donne des résultats prometteurs. La détermination des délais d'allumage tient maintenant compte des propriétés du solide, du gaz et de leur interaction par le biais d'un échauffement de la surface par les gaz de la flamme. Les cas classiques d'allumage semblent donc pouvoir être reproduits.

Des études récentes réalisées à l'ISL ont montré que dans certains cas, le délai d'allumage peut être très long (de l'ordre de la seconde). Ce phénomène, dont on ne connaît pas encore l'explication précise, peut fortement perturber le système de propulsion.



FIG. 2.11 – Schéma d'un allumeur

On présente ici une expérience qui rend compte d'un long délai d'allumage. La figure 2.11 représente l'allumeur : un tube perforé dans lequel une petite quantité d'une poudre noire (différente de la poudre de propulsion de la chambre) est allumée par un mécanisme pyrotechnique. La combustion de cette poudre noire dégage des gaz chauds qui s'échappent de l'allumeur par les trous et vont se propager dans le chargement. Ce chargement est composé de poudre propulsive R5730.

On place des capteurs de pression à différents endroits de la paroi (voir figure 2.12). La chambre est fermée par une membrane qui casse lorsque la contrainte due à la pression de la chambre dépasse une certaine intensité.

Ce système est complété par l'ajout d'une fibre optique et d'une photodiode (photographie de la figure 2.13) au milieu de l'allumeur (capteur L0b sur la figure 2.12) permettant de déterminer avec précision les instants où des phénomènes lumineux se produisent, concrètement lorsque la poudre noire et la poudre propulsive s'allument.

Remarque 14: Pour des raisons pratiques, le temps initial ne correspond pas au début des mesures mais au moment où l'allumeur commence à débiter.

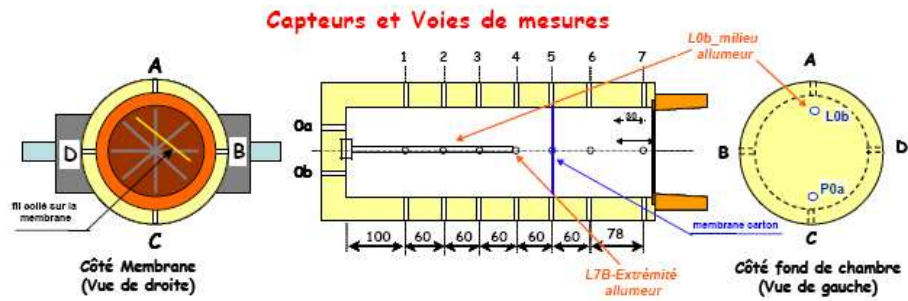


FIG. 2.12 – Configuration du système de mesure



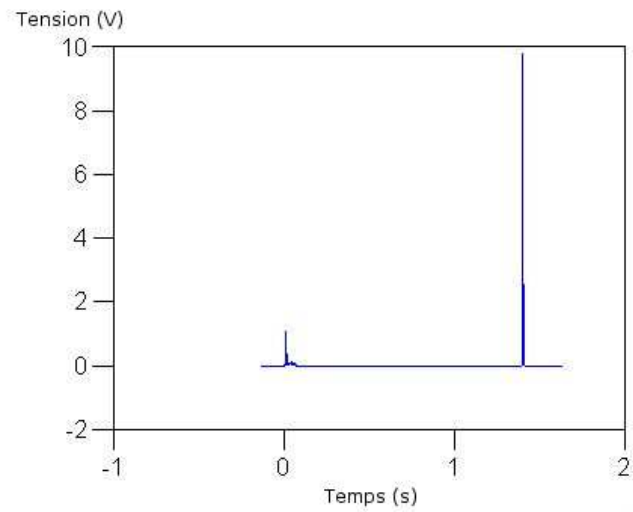
FIG. 2.13 – Système de détection d'allumage par fibre optique

La figure 2.14a représente la réponse de la photodiode à une excitation lumineuse. On observe deux pics décalés de 1.4 seconde. Le premier pic correspond au moment où l'allumeur commence à débiter tandis que le second correspond à l'allumage de la poudre propulsive. Les mesures de pressions (figure 2.14b) montrent un pic de pression à 1.4 seconde mais aucun phénomène n'est enregistré avant.

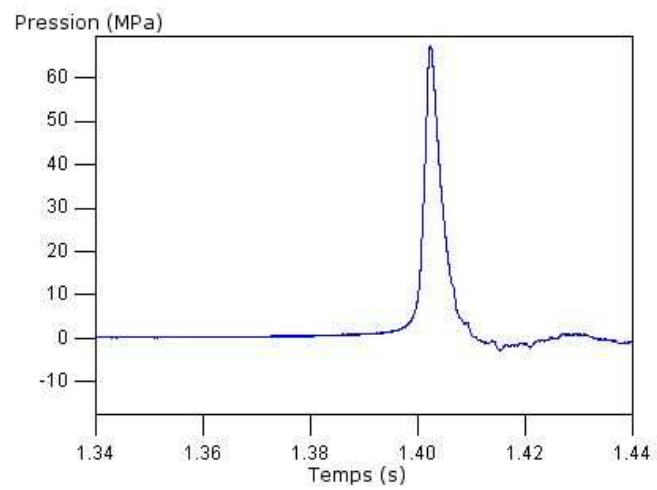
Pendant 1.4 seconde, il n'y a donc aucun phénomène enregistré au niveau de la pression ou de l'intensité lumineuse. Pour l'instant, on suppose que la phase solide se décompose en un mélange gazeux qui ne s'enflamme pas immédiatement par manque d'énergie. Il se produit alors une série de réactions chimiques complexe en phase gazeuse qui aboutit à l'inflammation du mélange.

Notre modèle d'allumage ne peut pour l'instant reproduire un tel phénomène que l'on appelle "long feu". Le modèle de cinétique chimique inclus dans nos équations n'est pas assez complexe pour pouvoir simuler l'évolution d'un mélange gazeux instable. Afin de résoudre ce problème, il est nécessaire de se pencher sur les problèmes d'auto-inflammation de mélanges gazeux, ce qui nécessite de prendre en compte un mécanisme chimique plus détaillé, avec plusieurs espèces et plusieurs réactions en parallèle.

Pourtant hors du cadre initial de la thèse, les travaux sur le modèle de combustion à basse pression sont très prometteurs. Les premiers résultats nous ont encouragés à nous pencher un peu plus sur cette voie. Des projets sont en cours d'élaboration dans l'optique de valider le modèle par confrontation avec des résultats expérimentaux pour des poudres connues et éventuellement de le calibrer. Ces travaux ont fait partie d'un contrat gouvernemental [Nus07] ainsi que d'un arrangement technique trinational sur les phénomènes d'allumage [Nus06] et ont été présentés publiquement sous la forme d'un poster à l'ICDERS de Poitiers [NFC07].



a - Réponse de la photodiode (L0b)



b - Mesures de le pression (P0a)

FIG. 2.14 – Exemple de long délai d'allumage

Chapitre 3

Aspects numériques

Le chapitre précédent traitait de l'aspect physique des phénomènes d'allumage et de combustion. Ces études servent à modéliser en partie les interactions entre les phases de notre écoulement diphasique, c'est-à-dire les gaz et la poudre. Nous nous penchons maintenant sur l'aspect numérique de notre modèle d'écoulement.

Le modèle de Gough [Gou79] décrit dans le premier chapitre s'inscrit dans l'approche eulérienne. L'approche Eulérienne décrit le mélange diphasique comme un ensemble de zones purement monophasiques. Les phases sont considérées comme des milieux continus distincts qui peuvent cohabiter dans le domaine de calcul en étant séparées par une interface. Cela revient à résoudre les équations décrivant chaque phase à l'aide des variables d'état moyennes. Le livre de Gidaspow [Gid94] est une bonne référence sur ce sujet. Les phases sont décrites par des équations Eulériennes de bilan moyennées, en considérant la phase solide comme incompressible. Les transferts interphasiques (masse, quantité de mouvement et énergie) sont modélisés par différentes relations issues de travaux théoriques ou expérimentaux.

Dans le chapitre 1, nous considérons le modèle de Gough monodimensionnel (uniquement la vitesse axiale). Or, les écoulements à l'intérieur d'un système de propulsion sont par nature tridimensionnels. L'allumage de la poudre propulsive se fait principalement par transfert thermique convectif entre des gaz chauds issus des événements de l'allumeur et la surface des grains. Pour éviter d'avoir de trop forts gradients de pression à l'intérieur de la chambre de combustion, il est nécessaire d'allumer le lit de poudre de la manière la plus homogène possible. Pour cela, on utilise des allumeurs dont les événements sont bien répartis non seulement sur sa longueur, mais aussi sur sa circonférence. Une partie des études de balistique intérieure porte sur l'optimisation de la géométrie des allumeurs, et la nature tridimensionnelle des écoulements des gaz d'allumage doit donc être prise en compte.

Les variations de la géométrie d'une chambre de combustion ajoutent aussi un effet multidimensionnel au problème. La variation de section du cône de forçement (voir figure 3.1), qui correspond à un rétrécissement du diamètre de la chambre de combustion à la jonction avec le tube d'expulsion du projectile, influence fortement les performances du système. Il est

donc nécessaire de pouvoir simuler des canons à diamètre variable.

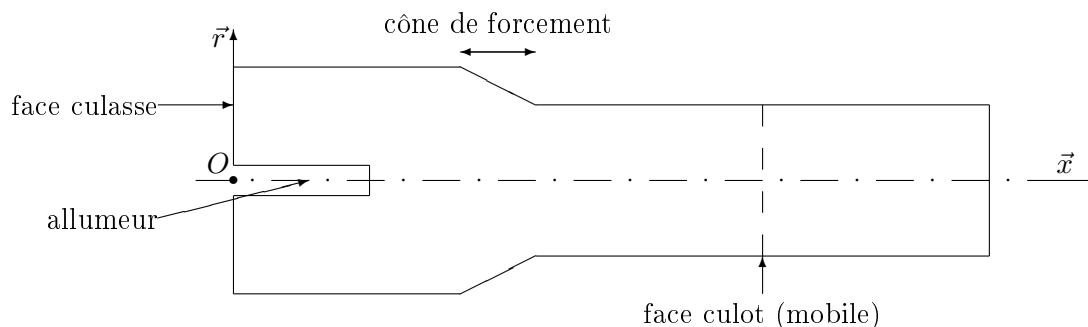


FIG. 3.1 – Schéma simplifié d'un canon

Enfin, l'allumeur est placé au centre de la charge propulsive, le long de l'axe de révolution du système. Les événements par lesquels s'échappent les gaz d'allumage sont situés sur la circonférence du cylindre. L'extrémité de l'allumeur provoque une discontinuité dans le rayon du domaine de calcul. En général, les allumeurs ont un diamètre relativement faible comparé au diamètre de la chambre, et donc l'effet de cette brusque variation reste faible. Pourtant, il n'est pas exclu que dans le cadre d'études sur l'optimisation des allumeurs, on soit un jour amené à utiliser des allumeurs dont le diamètre sera plus important. Cette propriété géométrique est délicate à traiter du point de vue numérique avec les équations monodimensionnelles à section variable décrivant les phases.

Le premier chapitre a permis de montrer que notre système d'équations aux dérivées partielles est conditionnellement hyperbolique. Les systèmes hyperboliques de lois de conservation ont déjà fait l'objet de nombreuses études. Nous citerons par exemple l'ouvrage de référence de Godlewski et Raviart [GR91] ou Toro [Tor99]. Ces études ont permis de développer différents schémas numériques comme par exemple le schéma de Godunov [God59], le schéma de Roe [Roe81] ou plus récemment le schéma vRoe [GM96], [MFG99] ou sa variante en variables non conservatives [BGH96]. Ces schémas ne sont pas applicables aux systèmes non hyperboliques, car les valeurs propres du système ne sont pas toutes réelles. Initialement, nous avons utilisé le schéma de Rusanov pour résoudre notre système général. La très grande diffusion de ce schéma le rend robuste mais peu précis. On améliore ici légèrement la précision en utilisant le schéma HLL [HLL83] qui est un schéma de Godunov approché, tandis que le schéma de Rusanov est un schéma de Lax-Friedrich modifié. Ce choix est justifié par le fait qu'avec un schéma numérique trop précis, des oscillations vont apparaître.

Pour pallier ce problème d'hyperbolicité, nous proposons de simuler la partie convective du système considéré à l'aide d'une méthode à pas fractionnaires [Yan68]. On décompose le

système général non hyperbolique en deux sous-systèmes hyperboliques qu'on résout successivement. Même si le problème initial est toujours mal posé, cette méthode permet de gagner un peu plus de stabilité et de calculer des vitesses d'ondes réelles pour notre schéma numérique, qui étaient évaluées jusqu'à présent de manière peu conventionnelle (on surestimait la valeur maximale des ondes afin d'avoir une viscosité numérique suffisante pour que le schéma soit stable).

Un autre problème mathématique résulte de la présence de termes non conservatifs dans notre système. Alors que les schémas numériques classiques sont applicables à des systèmes conservatifs, les contributions non-conservatives doivent faire l'objet d'un traitement particulier. En effet, les discontinuités des solutions aux interfaces entre les cellules provoquent une singularité au niveau de leurs dérivées. Des relations de saut doivent être déterminées. Ces relations nécessitent de connaître en détails les caractéristiques des ondes et des champs associés, en particulier en présence de chocs. Nous proposons d'adapter le schéma HLL aux cas non conservatifs en suivant l'idée proposée par Combe et Hérard [CH99] et décrite dans [NHH06]. L'utilisation de cette méthode simple est justifiée dans notre cas par le fait qu'il n'y a pas d'onde de choc qui se propage lors des simulations associées aux problèmes de balistique intérieure. Un tel phénomène serait catastrophique pour la sécurité du système de propulsion.

Nous souhaitons donc simuler des écoulements diphasiques de une à trois dimensions d'espace. Nous avons à traiter des variations de section continues (cône de forçement) ou discontinues (extrémité de l'allumeur). Pour éviter de modifier le système général suivant la dimension du problème, nous utilisons le cas général des équations tridimensionnelles résolues sur des maillages 3D particuliers. La construction de ces maillages ainsi que l'algorithme général de résolution sont détaillés dans l'annexe A page 181. Dans la première partie de ce chapitre, nous rappelons les équations de notre modèle et nous détaillons la méthode des volumes finis ainsi que le schéma numérique employé. Nous présentons ensuite la méthode à pas fractionnaires et l'étude détaillée de l'hyperbolicité de chaque sous-système. La troisième section traite des conditions aux limites, avec une attention particulière pour les cas délicats de l'entrée des gaz issus de l'allumeur dans le domaine de calcul et le traitement de la paroi mobile correspondant au déplacement du projectile. Enfin, nous validons notre algorithme par des simulations numériques monophasiques et diphasiques sur divers cas tests de type "tube à choc" ou à section variable.

3.1 Rappel du modèle mathématique

Nous présentons brièvement notre modèle mathématique, composé des équations de bilan de masse et de quantité de mouvement pour les deux phases ainsi que de l'équation de conservation de l'énergie de la phase gazeuse, la phase solide étant considérée comme incompressible. Pour pouvoir simuler l'allumage puis la combustion de la poudre, deux équations de transport pour l'enthalpie et l'épaisseur de poudre brûlée sont ajoutées au système dont

la forme générale s'écrit en trois dimensions d'espace

$$\partial_t W + \nabla \cdot F(W) + \sum_{j=1}^d C_j(W) \cdot \frac{\partial W}{\partial x_j} = S(W), \quad (3.1)$$

où

$$\nabla \cdot F(W) = \sum_{j=1}^d \frac{\partial F_j(W)}{\partial x_j}. \quad (3.2)$$

Nous prendrons la dimension en espace d égale à 3. Le vecteur des variables conservatives $W = W(x, t) \in \Omega \subset \mathbb{R}^{11}$ est inconnu. On note $t > 0$ la variable de temps et $x = (x_1, x_2, x_3) \in]0, L[\times \mathcal{C}$ la variable d'espace avec L la longueur totale du tube et pour le cas le plus simple où on ne tient pas compte de la géométrie de l'allumeur, $\mathcal{C} = \{(x_1, x_2, x_3), x_2^2 + x_3^2 \leq r(x_1)^2\}$, $r(x_1)$ étant le rayon de la section variable (dépendant de x_1). Les vecteurs de flux F_i et le vecteur des termes sources S sont des fonctions de Ω dans \mathbb{R}^{11} et C_j est une fonction de Ω dans $\mathbb{R}^{11 \times 11}$.

On pose

$$W = (\alpha_2, \alpha_1 \rho_1, \alpha_1 \rho_1 U_1^T, \alpha_2 \rho_2 U_2^T, \alpha_1 E_1, H_{ts}, d)^T \quad (3.3)$$

où α_k est la fraction volumique, ρ_k la densité, $U_k^T = (u_k, v_k, w_k)$ le vecteur vitesse, p_k la pression et E_k l'énergie totale de la phase k . L'indice $k = 1$ correspond à la phase gazeuse tandis que $k = 2$ correspond à la phase solide. L'enthalpie spécifique des grains est notée H_{ts} et l'épaisseur de poudre brûlée notée d .

Le gaz suit une loi d'état de type Noble et Abel

$$p_1(\rho_1, e_1) = \frac{(\gamma - 1) \rho_1 e_1}{1 - \eta \rho_1} \quad (3.4)$$

où η est le covolume et l'énergie interne e_1 est telle que

$$E_1 = \rho_1 \left(e_1 + \frac{1}{2} \|U_1\|^2 \right). \quad (3.5)$$

La pression p_2 de la phase solide est considérée égale à la pression des gaz p_1 à laquelle on ajoute la contrainte due au aux autres grains du lit de poudre $\Lambda(\alpha_2, \rho_2)$ que l'on nomme contrainte intergranulaire. La pression p_2 s'exprime donc

$$p_2 = p_1 + \Lambda(\alpha_2, \rho_2). \quad (3.6)$$

Les flux sont notés

$$\begin{aligned}
 F_1(W) &= \begin{pmatrix} \alpha_2 u_2 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_1 (\rho_1 u_1^2 + p_1) \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 v_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 w_1 \\ \alpha_2 (\rho_2 u_2^2 + p_2) \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 v_2 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 w_2 \\ \alpha_1 u_1 (E_1 + p_1) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & F_2(W) &= \begin{pmatrix} \alpha_2 v_2 \\ \alpha_1 \rho_1 v_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 v_1 \\ \alpha_1 (\rho_1 v_1^2 + p_1) \\ \alpha_1 \rho_1 v_1 w_1 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 v_2 \\ \alpha_2 (\rho_2 v_2^2 + p_2) \\ \alpha_2 \rho_2 v_2 w_2 \\ \alpha_1 v_1 (E_1 + p_1) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 F_3(W) &= \begin{pmatrix} \alpha_2 w_2 \\ \alpha_1 \rho_1 w_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 w_1 \\ \alpha_1 \rho_1 v_1 w_1 \\ \alpha_1 (\rho_1 w_1^2 + p_1) \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 w_2 \\ \alpha_2 \rho_2 v_2 w_2 \\ \alpha_2 (\rho_2 w_2^2 + p_2) \\ \alpha_1 w_1 (E_1 + p_1) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

et la contribution des termes convectifs non conservatifs

$$\begin{aligned}
C_1(W) \frac{\partial W}{\partial x_1} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ p_1 \partial_{x_1} \alpha_2 \\ 0 \\ 0 \\ -p_1 \partial_{x_1} \alpha_2 \\ 0 \\ 0 \\ p_1 \partial_{x_1} (\alpha_2 u_2) \\ u_2 \partial_{x_1} H_{ts} \\ u_2 \partial_{x_1} d \end{pmatrix}, & C_2(W) \frac{\partial W}{\partial x_2} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ p_1 \partial_{x_2} \alpha_2 \\ 0 \\ 0 \\ -p_1 \partial_{x_2} \alpha_2 \\ 0 \\ p_1 \partial_{x_2} (\alpha_2 v_2) \\ v_2 \partial_{x_2} H_{ts} \\ v_2 \partial_{x_2} d \end{pmatrix}, \\
C_3(W) \frac{\partial W}{\partial x_3} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ p_1 \partial_{x_3} \alpha_2 \\ 0 \\ 0 \\ -p_1 \partial_{x_3} \alpha_2 \\ p_1 \partial_{x_3} (\alpha_2 w_2) \\ w_2 \partial_{x_3} H_{ts} \\ w_2 \partial_{x_3} d \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.8}$$

On ne détaillera pas à nouveau le terme source $S(W)$, décrit dans le chapitre 1, section 1.2.

Notre modèle peut être classé dans la catégorie des modèles à une pression, étudiés entre autres dans les travaux de Gidaspow [Gid94], Combe et Hérard [CH99], Goldstein et *al* [GSG96] et Simonin [Sim95], car il existe une relation algébrique entre la pression de chaque phase, exprimée par (3.6). Contrairement aux modèles à deux pressions qui peuvent être inconditionnellement hyperboliques, les modèles à une pression sont généralement non hyperboliques. Dans les modèles à deux pressions, le calcul de la pression pour chaque phase est indépendant. Cette approche est utilisée dans le modèle de Baer et Nunziato [BN86], souvent étudié par la suite [KSB⁺97], [GS02]. D'autres modèles à deux pressions ont été développés par Glimm et *al* [GSS99]. L'ajout de la contrainte intergranulaire à l'expression de p_2 nous permet d'avoir un modèle qui est conditionnellement hyperbolique. En effet, dans [NHHC06], nous avons démontré que pour le modèle unidimensionnel

- $c_2 = 0, u_1 = u_2$: le système est hyperbolique ;
- $c_2 = 0, u_1 \neq u_2, \left| \frac{u_2 - u_1}{c_1} \right| \leq 1$: le système n'est pas hyperbolique ;
- $0 < c_2 < c_1, |u_2 - u_1| \leq \max(c_2, c_1 - c_2)$: le système est hyperbolique.

On note ici c_1 la vitesse du son dans le gaz qui s'exprime

$$c_1^2 = \frac{\gamma p_1}{\rho_1 (1 - \eta \rho_1)}. \quad (3.9)$$

La vitesse du son dans un grain de poudre est infinie, mais on peut définir une vitesse du son finie dans un mélange de grains par

$$c_2^2 = \rho_2^{-1} \left(\Lambda + \alpha_2 \frac{\partial \Lambda}{\partial \alpha_2} \right). \quad (3.10)$$

La contrainte intergranulaire $\Lambda(\alpha_2, \rho_2)$ s'exprime dans notre cas

$$\Lambda(\alpha_2, \rho_2) = \begin{cases} 0 & \text{si } \alpha_2 < 1 - \alpha_c, \\ \frac{\rho_2 c_l^2 \alpha_c (\alpha_c + \alpha_2 - 1)}{\alpha_2 (1 - \alpha_2)} & \text{si } \alpha_2 \geq 1 - \alpha_c. \end{cases} \quad (3.11)$$

On note c_l une vitesse du son mesurée expérimentalement dans le lit de particules et α_c la porosité critique considérée classiquement comme la porosité initiale, excepté dans des cas particuliers où la charge propulsive est compactée dans la chambre de combustion. On rappelle que la porosité est définie comme la fraction volumique de gaz dans un volume donné.

Pendant la majeure partie de la simulation, nous nous trouvons dans le deuxième cas. En effet, la contrainte intergranulaire est nulle quasiment tout le temps du fait de la combustion car

$$\alpha_2 < 1 - \alpha_c \quad \Rightarrow \quad \Lambda(\alpha_2, \rho_2) = 0, \quad (3.12)$$

or

$$\Lambda(\alpha_2, \rho_2) = 0 \quad \Rightarrow \quad c_2 = 0. \quad (3.13)$$

Comme la vitesse relative entre les phases est faible comparée à c_1 , on a bien

$$\left| \frac{u_2 - u_1}{c_1} \right| \leq 1. \quad (3.14)$$

Cette contrainte intergranulaire décrit l'apparition d'une pression de résistance lorsque le taux de présence des particules devient trop grand. On peut donc observer deux phénomènes : le lit compacté, où les grains agissent entre eux et provoquent une pression supplémentaire dans le système, et le lit fluidisé, c'est-à-dire lorsque les particules sont suffisamment diluées dans le gaz pour qu'on puisse négliger les interactions entre les grains. Dans les cas de balistique intérieure, la combustion décompose les grains en gaz. La porosité augmente donc et devient quasi-immédiatement supérieure à la porosité critique, ce qui correspond à un lit fluidisé, et donc conduit à la disparition de la contrainte intergranulaire.

On remarque que la contrainte intergranulaire ainsi que la vitesse du son équivalente dans le lit tendent vers l'infini lorsque la porosité tend vers 0 (c'est-à-dire quand l'espace entre les grains diminue), soit

$$\lim_{\alpha_2 \rightarrow 1} \Lambda(\alpha_2, \rho_2) = +\infty, \quad \lim_{\alpha_2 \rightarrow 1} c_2 = +\infty. \quad (3.15)$$

Le lit de poudre a donc tendance à adopter le comportement d'un solide incompressible lorsque la compaction devient très importante, ce qui est tout à fait réaliste.

Les équations du modèle étant posées, nous présentons maintenant la méthode numérique de résolution de notre système de lois de conservation.

3.2 Méthode des volumes finis

Pour résoudre le système d'équations aux dérivées partielles (3.1), nous utilisons la méthode des volumes finis pour des maillages multidimensionnels qu'on rappelle dans cette partie.

Au système (3.1) on associe une condition initiale

$$W(x, 0) = W_{\text{ini}}(x), \quad x \in \Omega, \quad (3.16)$$

et des conditions au bord $\partial\Omega$ du domaine Ω

$$W(x, t) = W_{\text{bord}}(x), \quad t > 0, \quad x \in \partial\Omega. \quad (3.17)$$

Les conditions au bord diffèrent selon les phénomènes qu'on veut simuler. Nous détaillerons dans la suite les différentes conditions aux limites qu'on applique à notre domaine de calcul.

En considérant le système (3.1) sans termes sources, on peut écrire

$$W_t + \sum_{j=1}^d F_j(W)_{x_j} + \sum_{j=1}^d C_j(W) W_{x_j} = 0 \quad (3.18)$$

avec les notations

$$\begin{aligned} W_t &= \frac{\partial W}{\partial t}, \\ W_{x_j} &= \frac{\partial W}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

En décomposant

$$\frac{\partial F_j(W)}{\partial x_j} = \frac{\partial F_j(W)}{\partial W} \frac{\partial W}{\partial x_j} \quad (3.20)$$

avec $\frac{\partial F_j(W)}{\partial W}$ la jacobienne de F_j , on peut alors exprimer (3.18) sous la forme

$$W_t + \sum_{j=1}^d (F_j(W)_W + C_j(W)) W_{x_j} = 0. \quad (3.21)$$

Définition 1 *Le système (3.18) est dit hyperbolique sur l'ensemble des états admissibles $W_{ad} \subset \mathbb{R}^{11}$ si et seulement si pour tout $W \in W_{ad}$ et pour tout vecteur $n = (n_1, \dots, n_d)$ la matrice 11×11*

$$A(W, n) = \sum_{j=1}^d n_j (F_j(W)_W + C_j(W)) \quad (3.22)$$

a des valeurs propres réelles et l'espace des vecteurs propres associés est dans \mathbb{R}^{11} .

Il est bien connu que (3.18), (3.16), (3.17) peut admettre une infinité de solutions faibles.

Afin d'approcher les solutions du problème (3.18), (3.16), (3.17), la méthode des volumes finis (qui a été introduite pour simuler les systèmes de lois de conservation, c'est-à-dire où $C_j(W) = 0$) consiste dans un premier temps à découper le domaine de calcul Ω en des ouverts \mathcal{C}_k , $k \in I = \{1, \dots, N\}$, appelés cellules ou volumes finis tels que

1. $\bigcup_{k \in I} \overline{\mathcal{C}_k} = \overline{\Omega}$,
2. $\forall (k, l) \in I \times I, k \neq l \Rightarrow \mathcal{C}_k \cap \mathcal{C}_l = \emptyset$.

Le domaine temporel est découpé de même en une suite d'intervalles $]t_n, t_{n+1}[$ tels que $t_0 = 0$, $t_P = T$, $t_n < t_{n+1}$. Le pas de temps est noté $\tau_n = t_{n+1} - t_n$. Les solutions W de (3.18) sont approchées dans chaque cellule \mathcal{C}_k et à chaque instant t_n par un vecteur constant par cellule

$$W_k^n \simeq W(x, t_n), \quad x \in \mathcal{C}_k. \quad (3.23)$$

Ces inconnues satisfont la relation

$$\int_{\mathcal{C}_k} W_k^{n+1} = \int_{\mathcal{C}_k} W_k^n - \tau_n \int_{\partial \mathcal{C}_k} \mathcal{F}(W_k^n, W_l^n, n_{kl}) - \tau_n \int_{\partial \mathcal{C}_k} \mathcal{G}(W_k^n, W_l^n, n_{kl}) = \text{cste} \quad (3.24)$$

Dans le second membre de (3.24), $\mathcal{F}(u, v, n)$ est la fonction *flux numérique conservatif* et $\mathcal{G}(u, v, n)$ prend en compte les termes convectifs non conservatifs. Ces flux numériques sont propres au schéma de volumes finis considéré. L'indice l est relatif aux cellules \mathcal{C}_l voisines de la cellule \mathcal{C}_k le long du bord $\partial \mathcal{C}_k$. Dans l'intégration sur $\partial \mathcal{C}_k$, l'indice l parcourt donc toutes les cellules voisines de \mathcal{C}_k . Si le bord de la cellule \mathcal{C}_k a une intersection avec $\partial \Omega$, la condition au bord (3.17) sert à calculer l'état frontière W_l^n . La condition initiale (3.16) permet d'initialiser le calcul

$$\int_{\mathcal{C}_k} W_k^0 = \int_{\mathcal{C}_k} W_{\text{ini}}. \quad (3.25)$$

Le vecteur n_{kl} est le vecteur normal unitaire sur $\partial \mathcal{C}_k$ orienté de \mathcal{C}_k vers \mathcal{C}_l .

Dans les cas les plus simples, les flux numériques doivent vérifier les propriétés :

1. propriété de conservation pour le flux conservatif :

$$\forall (W_L, W_R, n), \quad \mathcal{F}(W_L, W_R, n) = -\mathcal{F}(W_R, W_L, -n);$$

2. propriété de consistance du flux conservatif :

$$\forall (W, n), \quad \mathcal{F}(W, W, n) = F(W) \cdot n;$$

La méthode des volumes finis nécessite le calcul de ces flux numériques. Plusieurs méthodes existent pour les systèmes hyperboliques conservatifs, mais nous devons adapter ces méthodes à notre modèle non hyperbolique et non conservatif.

3.3 Schéma numérique

On s'attache maintenant à décrire notre schéma numérique. Pour les systèmes de lois de conservation hyperboliques, de nombreux travaux ont été effectués. Dans les années 50, Godunov [God59] a proposé un schéma de volumes finis dont le flux numérique conservatif est calculé à partir de solutions exactes du problème de Riemann pour le cas monodimensionnel.

La résolution du problème de Riemann peut être délicate et coûteuse sur le plan informatique, en terme de programmation et de temps de calcul. De nombreux auteurs, à travers une vaste littérature, ont donc proposé d'autres flux numériques conservatifs ou des méthodes de résolution approchées du problème de Riemann. On renvoie par exemple aux livres de Godlewski et Raviart [GR96], de Toro [Tor99] et aux références incluses. Il est aussi intéressant de donner quelques jalons : la résolution locale du problème de Riemann est abordée dans un cadre général par Lax dans [Lax72]. Un des schémas les plus utilisés dans les codes de volumes finis industriels est le schéma de Roe [Roe81]. D'autres variantes existent comme le schéma ν RoeNCV [BGH96]. Dans un article de synthèse très complet, Harten, Lax et van Leer [HLL83] formalisent la notion de schéma de type Godunov et font le lien entre les notions de solveur de Riemann approché, de viscosité numérique et de schéma décentré. Ils introduisent aussi un nouveau schéma, le schéma HLL (Harten, Lax, van Leer) très général, robuste et simple à programmer.

Dans notre cas, nous sommes confrontés à deux problèmes

1. notre système est conditionnellement hyperbolique ;
2. nous devons calculer les contributions des termes convectifs non conservatifs.

Les travaux présentés ci-dessus ne sont donc pas applicables directement. En effet, la résolution approchée ou exacte du problème de Riemann nécessite de connaître les vitesses des ondes. Or certaines de ces vitesses sont complexes dans le cas non hyperbolique et n'ont pas de sens pour les schémas cités précédemment. Nous proposons cependant d'utiliser le schéma HLL pour plusieurs raisons

1. sa grande viscosité numérique le rend robuste, au détriment de la précision ;
2. son expression est simple et ne demande pas de connaître précisément toutes les caractéristiques des ondes ;
3. sur maillage grossier, on veut des solutions acceptables qui n'ont pas besoin d'être très précises, parce qu'on sait que la solution continue va finir par osciller si le maillage est trop fin (même si la force de traînée joue un rôle stabilisateur).

Ce schéma nécessite de connaître deux vitesses d'ondes. Nous proposons dans un premier temps de les choisir de manière à ce qu'elles soient suffisamment grandes pour que la viscosité numérique soit suffisante pour stabiliser le schéma. Grâce à la grande viscosité numérique du schéma, nous vérifierons numériquement que celui-ci reste stable sur des maillages grossiers.

En utilisant le schéma HLL, le flux conservatif s'écrit alors en une dimension d'espace

$$\mathcal{F}(W_L^n, W_R^n) = \begin{cases} F(W_L^n) & \text{si } a \geq 0, \\ \frac{bF(W_L^n) - aF(W_R^n) + ab(W_R^n - W_L^n)}{b-a} & \text{si } a < 0 < b, \\ F(W_R^n) & \text{si } b \leq 0. \end{cases} \quad (3.26)$$

On définit a et b par

$$\begin{aligned} a &= \min(s_{L,\min}^n, s_{R,\min}^n) \\ b &= \max(s_{L,\max}^n, s_{R,\max}^n) \end{aligned} \quad (3.27)$$

où $s_{k,\min}^n$ et $s_{k,\max}^n$, $k = L$ ou $k = R$, sont respectivement les vitesses d'ondes minimales et maximales dans les cellules à gauche et à droite de l'interface. Comme elles peuvent être à partie imaginaire non nulle dans les cas non hyperboliques, on les évalue de manière différente par

$$\begin{aligned} s_{k,\min}^n &= \min(\|U_1^n\| - c_1^n, \|U_2^n\| - c_2^n) \\ s_{k,\max}^n &= \max(\|U_1^n\| + c_1^n, \|U_2^n\| + c_2^n) \end{aligned} \quad (3.28)$$

qui correspondent aux vitesses des ondes des équations d'Euler compressibles prises séparément pour chaque phase. Ces expressions ne sont plus des valeurs propres de notre système.

Remarque 15: Classiquement, on impose que les ondes issues des interfaces n'atteignent pas les milieux des cellules. Ceci conduit à une condition de type CFL sur le pas de temps τ_n qui s'exprime

$$\tau_n < \min_{\mathcal{C}_j \in \Omega} \left(\frac{1}{s_{\mathcal{C}_j,\max}^n} \frac{V_{\mathcal{C}_j}}{S_{\mathcal{C}_j}} \right), \quad (3.29)$$

avec $V_{\mathcal{C}_j}$ le volume et $S_{\mathcal{C}_j}$ la surface totale du volume \mathcal{C}_j .

Le traitement des termes non conservatifs est également délicat. De nombreux travaux ont porté sur l'étude des systèmes non conservatifs. Nous citerons par exemple les travaux de LeFloch [LeF89] et *al* [MLM95] ainsi que ceux de Sainsaulieu [Sai95]. Nous devons calculer une relation de saut pour notre système, ce qui nécessite également de connaître en détail les ondes et les champs associés, ce qui est à nouveau impossible dans le cas non hyperbolique. Cette relation est surtout importante lorsqu'on souhaite capturer correctement les chocs. Dans les problèmes de balistique intérieure, il n'y a pas de chocs qui se propagent dans le lit de poudre. De forts gradients de pressions peuvent apparaître à cause d'un allumage non homogène de la charge propulsive, mais une onde de choc est uniquement créée par une détonation, phénomène physique totalement différent de la combustion. Certains dysfonctionnements (poudre trop énergétique, fracturation des grains, ...) peuvent cependant produire une onde de choc, mais le but de ces travaux n'est pas de simuler ce genre de processus.

La détermination de la relation de saut est traitée de la manière proposée dans [Com97] et [CH99], c'est-à-dire en fixant les matrices $C(W)$ sur \mathcal{C}_i et en calculant le saut de la discontinuité de $\partial_x W$ à travers chaque face à l'aide de la valeur centrée de W , ce qui donne en une

dimension d'espace

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(W_L, W_R)^- &= C_j(W_L) \frac{W_L + W_R}{2}, \\ \mathcal{G}(W_L, W_R)^+ &= -C_j(W_R) \frac{W_L + W_R}{2}.\end{aligned}\tag{3.30}$$

On note $\mathcal{G}(W_L^n, W_R^n, n)^-$ la contribution des termes convectifs non conservatifs à gauche de l'interface entre les cellules L et R et $\mathcal{G}(W_L^n, W_R^n, n)^+$ à sa droite. Le vecteur $n_{j,LR}$ indique qu'on considère la normale à la surface dans le sens $L \rightarrow R$. Cette méthode est simple à implémenter et demande peu de calculs.

Remarque 16: Pour une étude détaillée du cadre théorique associé aux systèmes hyperboliques non conservatifs, on pourra se référer aux articles [Flo88], [FL92], [MLM95] et [Sai95]. D'autres schémas non conservatifs peuvent être classés en deux catégories : basés sur un solveur de Roe généralisé [Tou89], [Kum93], [TK96] ou sur des solveurs de type Godunov ([HFL94], [Lou95] ou [FHL97]), vRoe [Mas97] et Roe ([Hér95], [BHSU96]).

L'utilisation du schéma HLL classique est difficile à justifier rigoureusement dans notre cas puisque notre système n'est pas inconditionnellement hyperbolique. Nous sommes obligés de choisir des vitesses d'ondes qui ne correspondent pas à notre système de départ pour éviter les cas complexes et de les choisir assez grandes pour que le schéma reste stable. On propose maintenant de diviser le système global initial non hyperbolique en deux sous-systèmes hyperboliques, qu'on résout successivement. On utilise à cette occasion une méthode à pas fractionnaires. Même si le système général reste mal posé, nous gagnerons plus de stabilité sur maillage grossier et nous pourrions nous ramener à des schémas classiques pour chaque sous-système hyperbolique.

3.4 Méthode à pas fractionnaires

Dans [NHHC06], nous avons montré que notre modèle mathématique est conditionnellement hyperbolique. Nous proposons maintenant une méthode à pas fractionnaires, que nous avons présentée à la 39th AIAA Thermophysics Conference [NHHC07] et présentée à l'annexe E, où à chaque étape nous résolvons un sous-système hyperbolique tandis que le système général reste instable. Nous pouvons alors utiliser un solveur de Riemann approché à chaque étape en utilisant les véritables valeurs propres correspondantes à chaque sous-système car les vitesses des ondes sont désormais toujours réelles.

Nous nous inspirons de [CH99] pour proposer un découpage du système général en deux sous-systèmes hyperboliques. La décomposition des termes conservatifs et non conservatifs s'exprime par

$$\begin{aligned}F_j(W) &= F_j^{(1)}(W) + F_j^{(2)}(W), \\ C_j(W) &= C_j^{(1)}(W) + C_j^{(2)}(W).\end{aligned}\tag{3.31}$$

On résout séparément la partie convective du système et les termes sources. Le traitement de la partie convective se fait en deux étapes successives. On obtient donc une résolution en

trois étapes :

– première étape :

$$\partial_t W + \sum_{j=1}^d F_j^{(1)}(W)_{x_j} + \sum_{j=1}^d C_j^{(1)}(W) \cdot \frac{\partial W}{\partial x_j} = 0. \quad (3.32)$$

La condition initiale associée à ce sous-système est donnée par $W(x, t_n)$. La solution calculée est notée $W^*(x)$.

– deuxième étape :

$$\partial_t W + \sum_{j=1}^d F_j^{(2)}(W)_{x_j} + \sum_{j=1}^d C_j^{(2)}(W) \cdot \frac{\partial W}{\partial x_j} = 0. \quad (3.33)$$

Lors de la seconde étape, on utilise l'état $W^*(x)$ calculé à l'étape précédente pour avoir la condition initiale. On note $W^{**}(x)$ le nouvel état calculé.

– troisième étape :

$$\partial_t W = S(W) \quad (3.34)$$

La dernière étape est initialisée par l'état $W^{**}(x)$. L'état final à la fin du pas de temps est noté $W(x, t_{n+1})$.

Les deux premières étapes correspondant à la résolution du système convectif sans termes sources sont résolues par la méthode des volumes finis en utilisant les flux conservatifs (3.26) et la contribution des termes convectifs non conservatifs (3.30) décrits précédemment.

3.4.1 Premier pas

On propose de résoudre le système

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 + \nabla \cdot (\alpha_2 U_2) = 0 \quad (3.35a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1) = 0 \quad (3.35b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 U_1) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 U_1 \otimes U_1) = 0 \quad (3.35c)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2 U_2) + \nabla \cdot (\alpha_2 \rho_2 U_2 \otimes U_2) + \nabla (\alpha_2 \Lambda(\alpha_2, \rho_2)) = 0 \quad (3.35d)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 E_1) + \nabla \cdot (\alpha_1 U_1 (E_1 + p_1)) + p_1 \nabla \cdot (\alpha_2 U_2) = 0 \quad (3.35e)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_{ts} = 0 \quad (3.35f)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} d = 0 \quad (3.35g)$$

avec $U_k^T = (u_k, v_k, w_k)$ où on note en une dimension d'espace

$$F^{(1)}(W) = \begin{pmatrix} \alpha_2 u_2 \\ 0 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1^2 \\ \alpha_2 (\rho_2 u_2^2 + \Lambda(\alpha_2, \rho_2)) \\ \alpha_1 u_1 (E_1 + p_1) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad C^{(1)}(W) W_x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ p_1 (\alpha_2 u_2)_x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.36)$$

Proposition 1 *Le système (3.32) est inconditionnellement hyperbolique en une dimension d'espace.*

Démonstration. Les valeurs propres correspondantes aux équations (3.35f) et (3.35g) étant triviales ($\lambda = 0$), on étudie le système composé uniquement des cinq premières équations. On réécrit les équations dans le système de variables primitives $Y = (\alpha_1, \rho_1, u_1, u_2, e_1)$. Le système s'écrit alors

$$Y_t + B_1(Y) Y_x = 0 \quad (3.37)$$

avec

$$B_1(Y) = \begin{bmatrix} u_2 & 0 & 0 & -\alpha_2 & 0 \\ -\frac{\rho_1 u_2}{\alpha_1} & 0 & 0 & \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \rho_1 & 0 \\ \frac{u_1^2}{\alpha_1} & \frac{u_1^2}{\rho_1} & 2u_1 & 0 & 0 \\ -\frac{c_2^2}{\alpha_2} & 0 & 0 & u_2 & 0 \\ \frac{1}{\alpha_1} \left(u_1 \left(e_1 - \frac{u_1^2}{2} \right) + \frac{p_1}{\rho_1} (u_1 - u_2) \right) & \frac{u_1}{\rho_1} \left(p_{1,\rho_1} - \frac{u_1^2}{2} + e_1 \right) & e_1 - \frac{u_1^2}{2} + \frac{p_1}{\rho_1} & \frac{\alpha_2 p_1}{\alpha_1 \rho_1} & u_1 \left(1 + \frac{p_{1,e_1}}{\rho_1} \right) \end{bmatrix} \quad (3.38)$$

Le calcul du polynôme caractéristique $P_1(\lambda)$ nous donne

$$P_1(\lambda) = \lambda(\lambda - 2u_1)(u_2 - c_2 - \lambda)(u_2 + c_2 - \lambda) \left(u_1 \left(1 + \frac{p_{1,e_1}}{\rho_1} \right) - \lambda \right) \quad (3.39)$$

ce qui correspond aux valeurs propres

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = 2u_1, \quad \lambda_{3,4} = u_2 \pm c_2, \quad \lambda_5 = \frac{\gamma - \eta \rho_1}{1 - \eta \rho_1} u_1 \quad (3.40)$$

Les vecteurs propres à droite associés s'écrivent

$$\begin{aligned} v_{\lambda_1} &= \left(0, 2(\rho_1 + p_{1,e_1}), -\frac{u_1}{\rho_1}(\rho_1 + p_{1,e_1}), 0, \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{u_1^2}{2} - e_1 - 2p_{1,\rho_1} \right)^T, \\ v_{\lambda_2} &= \left(0, 0, \left(\frac{p_{1,e_1}}{\rho_1} - 1 \right) u_1, 0, \frac{u_1^2}{2} - e_1 - \frac{p_1}{\rho_1} \right)^T, \\ v_{\lambda_{3,4}} &= \left(\alpha_1 \rho_1 \Psi, -\rho_1^2 \Psi, 0, \mp \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \rho_1 c_2 \Psi, p_1 (u_1 - u_2 \mp c_2) - u_1 \rho_1 p_{1,\rho_1} \right)^T, \\ v_{\lambda_5} &= (0, 0, 0, 0, 1)^T, \end{aligned} \quad (3.41)$$

en posant

$$\Psi = \left(u_2 \pm c_2 - u_1 \left(1 - \frac{p_{1,e_1}}{\rho_1} \right) \right). \quad (3.42)$$

Les valeurs propres sont toutes réelles et l'espace vectoriel engendré par les vecteurs propres associés est de dimension 5, donc notre système associé à la première étape est hyperbolique. On peut également accéder à la solution exacte pour le problème de Riemann (découplé des autres équations) associé à cette étape pour le couple (α_2, u_2) car on est en présence d'un système de type Euler isentropique (car ρ_2 est constant), mais à thermodynamique particulière (pression intergranulaire), qui s'écrit

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2) + \nabla \cdot (\alpha_2 \rho_2 u_2) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2 u_2) + \nabla \cdot (\alpha_2 (\rho_2 u_2 \otimes u_2 + \Lambda(\alpha_2, \rho_2))) = 0. \end{cases} \quad (3.43)$$

Ce système est conservatif et strictement hyperbolique, et il existe une unique solution au problème de Riemann selon (α_2, u_2) si et seulement si les conditions initiales vérifient

$$u_{2,R} - u_{2,L} < \int_0^{\alpha_{2,L}} \frac{c(\alpha)}{\alpha} d\alpha + \int_0^{\alpha_{2,R}} \frac{c(\alpha)}{\alpha} d\alpha \quad (3.44)$$

avec

$$c^2(\alpha) = p'(\alpha), \quad p(\alpha) = \frac{\alpha \Lambda(\alpha, \rho_2)}{\rho_2}. \quad (3.45)$$

La solution est telle que α est positif, avec en outre

$$\alpha < \alpha_{\max} \quad (3.46)$$

si $p(\alpha)$ admet une asymptote en α_{\max} .

En considérant le cas où $p(\alpha)$ n'admet pas d'asymptote en α_{\max} dans $]0; 1]$, la solution α du problème de Riemann peut dépasser la borne 1, ce qui n'est physiquement pas admissible. Il est facile de vérifier cette propriété par le calcul de la solution d'un double choc symétrique, où la vitesse initiale $U_{2,L} = -U_{2,R} > 0$ est prise de plus en plus grande. Pour ce problème de Riemann, on transforme en fait l'énergie cinétique en énergie de "pression" (granulaire dans ce cas). En effet, en posant $\alpha_{2,0} = \alpha_2(x_0)$ au centre du problème de Riemann, $(\alpha_2 \rho_2 U_2^2)_0$ initial n'est pas borné et au centre, où $U_2 = 0$ pour des raisons de symétrie, $\alpha_{2,0} \Lambda(\alpha_{2,0})$ devient alors très grand, ce qui n'est possible pour $0 < \alpha_{2,0} \leq 1$ (cas physique) que si la fonction $\Lambda(\alpha_2)$ admet une asymptote dans $]0; 1]$.

3.4.2 Deuxième pas

Pour ce second pas, on résout le système

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 = 0 \quad (3.47a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 U_1) = 0 \quad (3.47b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 U_1) + \alpha_1 \nabla p_1 = 0 \quad (3.47c)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2 U_2) + \alpha_2 \nabla p_1 = 0 \quad (3.47d)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 E_1) = 0 \quad (3.47e)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_{ts} + U_2 \nabla H_{ts} = 0 \quad (3.47f)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} d + U_2 \nabla d = 0 \quad (3.47g)$$

et on écrit en une dimension d'espace

$$F^{(2)}(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad C^{(2)}(W) W_x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha_1 p_{1,x} \\ \alpha_2 p_{2,x} \\ 0 \\ u_2 \\ u_2 \end{pmatrix}. \quad (3.48)$$

Proposition 2 *Le système (3.33) est inconditionnellement hyperbolique en une dimension d'espace.*

Démonstration. On considère toujours le cas monodimensionnel mais l'extension au cas multidimensionnel est naturelle. (3.35f) et (3.35g) étant des équations de transport, dont les valeurs propres associées sont $\lambda = u_2$, on étudie le système (3.35b) - (3.35e), que l'on réécrit dans le même système de variables que précédemment, à savoir $Y = (\alpha_1, \rho_1, u_1, u_2, e_1)^T$. En omettant les termes sources, le système devient alors

$$Y_t + B_2(Y) Y_x = 0 \quad (3.49)$$

avec

$$B_2(Y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\rho_1 u_1}{\alpha_1} & u_1 & \rho_1 & 0 & 0 \\ -\frac{u_1^2}{\alpha_1} & \frac{p_{1,\rho_1} - u_1^2}{\rho_1} & -u_1 & 0 & \frac{p_{1,e_1}}{\rho_1} \\ 0 & \frac{p_{1,\rho_1}}{\rho_2} & 0 & 0 & \frac{p_{1,e_1}}{\rho_1} \\ \frac{u_1}{\alpha_1} \left(\frac{u_1^2}{2} - e_1 \right) & \frac{u_1}{\rho_1} \left(\frac{u_1^2}{2} - e_1 - p_{1,\rho_1} \right) & \frac{u_1^2}{2} - e_1 & 0 & -\frac{p_{1,e_1}}{\rho_1} u_1 \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

Le calcul du polynôme caractéristique $P_2(\lambda)$ nous conduit à l'expression

$$P_2(\lambda) = -\lambda^3 Q(\lambda) \quad (3.51)$$

avec $Q(\lambda)$ un polynôme de degré deux de la forme

$$Q(\lambda) = 2\rho_1 \lambda^2 + 2p_{1,e_1} u_1 \lambda - p_{1,e_1} u_1^2 + 2p_{1,e_1} e_1 - 2\rho_1 p_{1,\rho_1}. \quad (3.52)$$

Pour vérifier que toutes les valeurs propres sont réelles, on calcule le discriminant Δ de $Q(\lambda)$, soit

$$\Delta = 4(p_{1,e_1}^2 u_1^2 + 4\rho_1^2 p_{1,\rho_1} + 2\rho_1 p_{1,e_1} u_1^2 - 4\rho_1 p_{1,e_1} e_1), \quad (3.53)$$

et grâce à l'équation d'état (3.4), on a

$$\Delta = 4\left(p_{1,e_1}^2 u_1^2 + 2\rho_1 p_{1,e_1} u_1^2 + \frac{4\eta}{1 - \eta\rho_1} \rho_1^2 p_1\right) \quad (3.54)$$

et comme on a

$$p_{1,e_1} \geq 0, \quad \rho_1 \geq 0, \quad p_1 \geq 0, \quad u_1^2 \geq 0, \quad 1 - \eta\rho_1 \geq 0, \quad (3.55)$$

on en déduit alors que

$$\Delta \geq 0. \quad (3.56)$$

On peut donc en déduire que toutes les valeurs propres sont réelles et s'expriment

$$\lambda_{1,2,3} = 0, \quad \lambda_{4,5} = u_2, \quad \lambda_{6,7} = \frac{-2p_{1,e_1} u_1 \pm \sqrt{\Delta}}{4\rho_1}. \quad (3.57)$$

Nous avons donc :

- la valeur propre triple nulle, qui correspondent aux équations (3.47a), (3.47e) et à l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 u_1 - \rho_2 u_2) = 0 \quad (3.58)$$

obtenue en calculant (3.47c)-(3.47d) et en utilisant (3.47a);

- la valeur propre double $\lambda_{4,5} = u_2$ qui correspond aux équations de transport (3.47f) et (3.47g);
- les valeurs propres $\lambda_{6,7} = \frac{-2p_{1,e_1} u_1 \pm \sqrt{\Delta}}{4\rho_1}$.

On remarque que pour $u_1 = u_2 = 0$, si on choisit comme loi d'état pour le gaz la loi des gaz parfaits, alors on obtient uniquement des valeurs propres nulles, et B_2 n'est plus diagonalisable. En fait, le système associé à l'étape 2 devient particulier (non diagonalisable) lorsque $u_1 = u_2 = 0$ et $e_1(p_1, \rho_1)$ vérifie

$$\frac{e_1}{\rho_1} + e_{1,\rho_1} = 0, \quad (3.59)$$

ce qui est le cas de la loi des gaz parfaits, mais pas de la loi de Noble et Abel.

Comme le système admet une valeur propre double et une valeur propre triple, il est nécessaire de vérifier que l'espace engendré par les vecteurs propres à droite associés à ces deux valeurs propres est de dimension cinq, et ainsi on aura démontré que le sous-système est hyperbolique. Pour la valeur propre double $\lambda_{4,5} = u_2$, les vecteurs propres à droite associés sont canoniques et dans l'orthogonal des vecteurs propres associés à B_2 . Pour la valeur propre triple nulle, les vecteurs propres à droite v_k associés s'écrivent

$$\begin{aligned} v_{\lambda_1} &= \left(1, 0, -\frac{u_1}{\alpha_1}, 0, 0 \right)^T, \\ v_{\lambda_2} &= \left(0, 1, -\frac{u_1}{\rho_1}, 0, -\frac{p_{1,\rho_1}}{p_{1,e_1}} \right)^T, \\ v_{\lambda_3} &= (0, 0, 0, 1, 0)^T, \end{aligned} \quad (3.60)$$

et les vecteurs propres à droite associés à $\lambda_{6,7}$ s'écrivent

$$v_{\lambda_{6,7}} = \left(0, 1, \frac{\lambda_{6,7} - u_1}{\rho_1}, \frac{\lambda_{6,7}}{\rho_2}, \frac{\lambda_{6,7}^2 - p_{1,\rho_1}}{p_{1,e_1}} \right)^T. \quad (3.61)$$

Si on se trouve dans le cas $u_1 = 0$ avec l'équation (3.59) qui est vérifiée, c'est-à-dire qu'on choisit par exemple la loi des gaz parfaits comme loi d'état, on se retrouve avec une valeur propre quintuple nulle, et on a $v_{\lambda_{6,7}} = v_{\lambda_2}$, et le système n'est plus diagonalisable. En utilisant la loi de Noble et Abel, nous évitons ce cas particulier et nous avons donc bien un sous-système associé à l'étape 2 qui est diagonalisable.

Le système associé à l'étape 2 est donc toujours hyperbolique, et les deux étapes de la méthode à pas fractionnaires sont donc hyperboliques.

Remarque 17: Les valeurs propres calculées ont des expressions peu classiques car elles ne sont pas physiques du fait de la décomposition du système général en deux sous-systèmes.

Remarque 18: La deuxième étape satisfait de manière triviale le principe du maximum pour α_2 .

Remarque 19: La structure (3.47f)-(3.47g) assure également un principe de maximum pour les variables H_{ts} et d , dans le cas de solutions régulières.

3.4.3 Troisième pas

Pour la dernière étape, on résout

$$\partial_t W = S(W) \quad (3.62)$$

Nous utilisons une simple formulation de type volumes finis explicite dont la forme discrétisée est

$$W_i^{n+1} = W_i^{**} + \tau_n S(W_i^{**}) \quad (3.63)$$

où $W_i^{n+1} = W(x_i, t_{n+1})$ est le vecteur d'état au pas de temps $n + 1$ dans la cellule i et $W_i^{**} = W^{**}(x)$ est le vecteur d'état à la fin de la deuxième étape dans la cellule i . D'autres traitements sont possibles [Com97], [Sai95].

3.4.4 Conclusion

Grâce à la méthode à pas fractionnaires et à notre proposition de décomposition du système général en deux sous-systèmes particuliers, on contourne le problème d'hyperbolicité de notre modèle général. Bien que le système de départ soit toujours mal posé, nous pouvons désormais utiliser les véritables valeurs propres des sous-systèmes associés à chaque étape pour calculer les flux numériques conservatifs par le schéma HLL. La viscosité numérique de notre schéma est calculée pour qu'elle soit suffisante afin de stabiliser la solution discrète sur des maillages grossiers. A priori, lorsque le pas de discrétisation devient petit, cette méthode n'empêchera pas la solution d'osciller, provoquant l'arrêt brutal du calcul.

La méthode numérique étant détaillée, il nous reste encore à expliciter les différentes conditions aux limites qui seront appliquées aux frontières de notre domaine de calcul.

3.5 Conditions aux limites

Il est maintenant nécessaire de décrire le traitement des conditions aux limites. On utilise la méthode des volumes fictifs aux bords, qui consiste à créer un volume virtuel à l'extérieur du domaine de calcul dont l'état noté W_{out} est extrapolé à partir de l'état W_{in} du volume voisin situé à l'intérieur du domaine de calcul. Le calcul de W_{out} dépend du phénomène que l'on veut modéliser.

En reprenant le schéma de la géométrie d'un canon, on peut recenser les différentes conditions aux limites nécessaires à nos simulations. La figure 3.2 donne un aperçu d'un cas type de distribution des conditions aux bords.

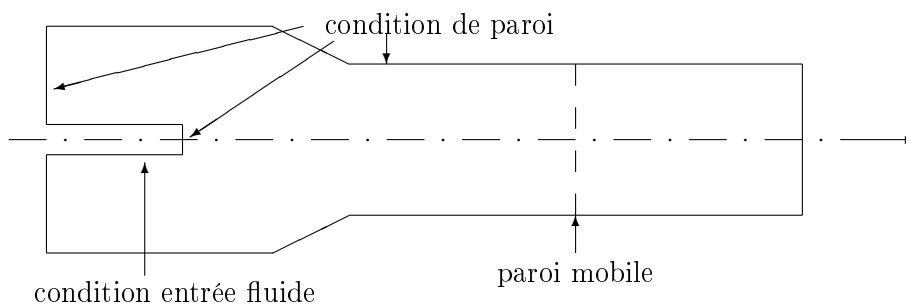


FIG. 3.2 – Conditions aux limites

Nous avons donc trois types de conditions aux limites : paroi, paroi mobile et entrée fluide. Pour les cas 1D et 2D, il faut encore tenir compte de la condition de symétrie par rotation qui s'applique aux faces latérales.

3.5.1 Condition de type paroi

Les parois du canon et de la chambre de combustion sont immobiles. Les ondes sont réfléchies sur ce type de bord, c'est pourquoi on introduit donc la condition aux limites de type miroir. L'état extérieur est en partie une copie de l'état intérieur, soit

$$(\alpha_2, \alpha_1 \rho_1, \alpha_1 E_1, H_{ts}, d)_{\text{out}}^T = (\alpha_2, \alpha_1 \rho_1, \alpha_1 E_1, H_{ts}, d)_{\text{in}}^T \quad (3.64)$$

mais pour qu'il y ait réflexion, les vitesses de phases sont retournées orthogonalement à l'interface entre les deux volumes, dont le vecteur normal est noté n , ce qui donne

$$(\alpha_k \rho_k U_k)_{\text{out}} = (\alpha_k \rho_k U_k)_{\text{in}} - 2 ((\alpha_k \rho_k U_k)_{\text{in}} \cdot n) n. \quad (3.65)$$

3.5.2 Condition de type symétrie par rotation

Pour les maillages 1D et 2D, on suppose que l'écoulement est axisymétrique. Une condition de rotation est imposée aux faces latérales des volumes, c'est-à-dire pour lesquelles $n \cdot \vec{\theta} \neq 0$, où $(0, \vec{x}, \vec{r}, \vec{\theta})$ définit le système de coordonnées cylindriques. On utilise la matrice de passage M du système de coordonnées cylindriques vers le système de coordonnées cartésiennes $(0, \vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ définie par

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}. \quad (3.66)$$

La discrétisation de la section dans le repère de coordonnées cartésiennes peut être schématisé par la figure 3.3.

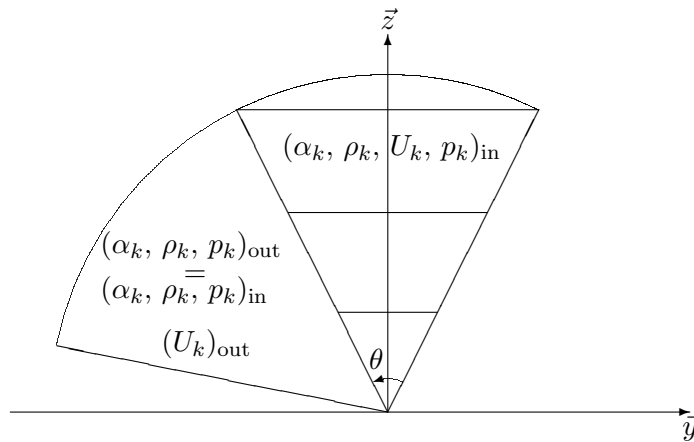


FIG. 3.3 – Exemple de discrétisation de la section

Comme précédemment, seules les composantes de W_{out} dépendant de la vitesse sont à modifier, on a donc

$$(\alpha_k \rho_k U_k)_{\text{out}} = M (\alpha_k \rho_k U_k)_{\text{in}} . \quad (3.67)$$

L'angle de discrétisation est donné par

$$\theta = \frac{2\pi}{n_\theta} . \quad (3.68)$$

En pratique, on utilise en général une discrétisation en 360 tranches, ce qui revient à avoir $\theta = 1^\circ$.

3.5.3 Condition de type paroi mobile

Le problème de balistique intérieure implique l'évolution du domaine de calcul qui s'allonge lors du déplacement du projectile. Pour le problème strictement unidimensionnel, nous avons utilisé une méthode de rezoning, qui dilate le maillage de façon homogène pendant la simulation [NHHC06]. Cette méthode est plus délicate à mettre en œuvre pour des maillages en dimension supérieure.

Toujours dans un souci de traiter le problème du point de vue général, nous utiliserons ici une méthode différente : seuls les volumes au contact du culot (donc de la paroi mobile) évolueront au cours du calcul. Concrètement, leur longueur $h^{(n)}$ suivant \vec{x} au pas de temps n , direction naturelle de déplacement de la paroi mobile, augmente en suivant le culot. Une fois atteint le double de leur longueur d'origine $h^{(0)}$, le volume est divisé en deux suivant \vec{x} et l'état calculé est recopié dans les deux nouvelles mailles.

L'algorithme de création des mailles est le suivant

- connaissant la section A du tube (constante sur le parcours du projectile), la pression de résistance à l'avancement du projectile p_r et la pression totale exercée par le gaz sur le culot $p_m^{(n)}$, l'application du principe fondamental de la dynamique nous permet de calculer la vitesse scalaire $u_p^{(n)}$ du projectile au pas de temps n par

$$\frac{d u_p^{(n)}}{d t} = \frac{d^2 x_p^{(n)}}{d t^2} = \max \left(0, \frac{A}{m_p} \left(p_m^{(n)} - p_r \right) \right) \quad (3.69)$$

où $x_p^{(n)}$ est la position du culot et m_p la masse du projectile. Il y a donc déplacement du projectile, c'est-à-dire $u_p^{(n)} > 0$ lorsque la pression motrice au culot devient supérieure à la pression de résistance à l'avancement.

- le pas de temps τ_n est calculé en respectant la condition de CFL (3.29).
- on évalue alors la nouvelle longueur des mailles par

$$h^{(n+1)} = h^{(n)} + \tau_n u_p^{(n)} . \quad (3.70)$$

- si $h^{(n+1)}$ est supérieure au double de sa longueur initiale $h^{(0)}$, on modifie le pas de temps pour qu'on obtienne exactement $h^{(n+1)} = 2h^{(0)}$ et sa nouvelle expression

$$\tau_n = \frac{2h^{(0)} - h^{(n)}}{u_p^{(n)}}, \quad (3.71)$$

ce qui nous permet de diviser la maille en deux et de conserver un maillage régulier. L'état extérieur W_{out} est calculé de la même façon que pour la condition de type paroi, mais en tenant compte en plus du flux lagrangien à travers la paroi mobile, ce qui s'écrit alors

$$(\alpha_k \rho_k U_k)_{\text{out}} = (\alpha_k \rho_k U_k)_{\text{in}} - (2 ((\alpha_k \rho_k U_k)_{\text{in}} \cdot n) - \alpha_k \rho_k u_p) n. \quad (3.72)$$

3.5.4 Condition de type entrée de fluide

On cherche maintenant à modéliser le fonctionnement de l'allumeur. L'allumeur est un tube percé dans lequel se trouve une petite quantité de poudre, généralement appelée "poudre noire", qui brûle et produit des gaz chauds du fait de sa combustion. Ces produits de réactions s'échappent par les événements de l'allumeur et se propagent dans le lit de poudre propulsive. L'apport d'énergie par transfert thermique chauffe les grains jusqu'à l'allumage.

Le but est de déterminer quel sera l'état W_{out} à l'intérieur du volume virtuel dans l'allumeur. Les gaz de l'allumeur sont supposés avoir les mêmes propriétés thermodynamiques que le gaz se situant dans la chambre et on suppose connues leur pression p_{out} et leur température T_{out} . Seuls les gaz sortent de l'allumeur, on aura donc une condition miroir pour la phase solide.

L'hypothèse d'un régime subsonique implique qu'une onde sort du domaine de calcul. On se place dans la configuration de la figure 3.4. On note par l'indice I et II les états intermédiaires entre les ondes qui se développent à partir d'un problème de Riemann monophasique. Nous avons donc deux ondes qui entrent dans le domaine : une discontinuité de contact et une 1-onde.

La nature de la 1-onde dépend de la différence de pression entre l'état intérieur et l'état extérieur : si $p_{\text{in}} > p_{\text{out}}$, alors ce sera une détente, et dans le cas contraire $p_{\text{in}} < p_{\text{out}}$, on aura un choc. Le calcul des états intermédiaires fait intervenir les invariants de Riemann et les invariants de choc. Ils dépendent de la nature de l'onde, donc nous devrions développer les équations pour chaque cas. Or, dans un choc de faible intensité, les invariants de Riemann sont approximativement constants (à l'ordre 3 par rapport au saut de pression) [GR96], [Dub01], [DL88]. Dans un souci de simplification, nous utiliserons uniquement le cas de la 1-détente.

Pour simplifier l'écriture, on se limite à une dimension d'espace pour la vitesse et on considère que le fluide est décrit par une loi d'état du type gaz parfait. L'état intérieur W_{in} est connu complètement puisqu'il fait partie du maillage, p_{out} et T_{out} le sont aussi mais la vitesse de l'état droit reste à déterminer pour que la condition aux limites soit bien définie.

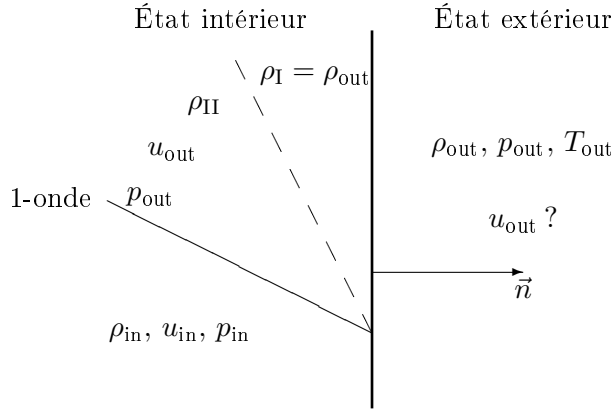


FIG. 3.4 – Configuration des ondes pour une entrée subsonique

À travers la 1-onde, l'entropie reste constante. On a donc

$$s_{\text{in}} = s_{\text{II}} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{p_{\text{in}}^{1/\gamma}}{\rho_{\text{in}}} = \frac{p_{\text{out}}^{1/\gamma}}{\rho_{\text{II}}}, \quad (3.73)$$

γ étant l'exposant polytropique du fluide, et l'invariant de Riemann nous donne

$$u_{\text{out}} + \frac{2c_{\text{II}}}{\gamma - 1} = u_{\text{in}} + \frac{2c_{\text{in}}}{\gamma - 1} \quad (3.74)$$

avec pour la loi des gaz parfaits la vitesse du son qui est donnée par

$$c_l = \sqrt{\frac{\gamma p_l}{\rho_l}}. \quad (3.75)$$

On en déduit l'expression de ρ_{II} et u_d

$$\rho_{\text{II}} = \rho_{\text{in}} \left(\frac{p_{\text{out}}}{p_{\text{in}}} \right)^{1/\gamma}, \quad (3.76)$$

$$u_{\text{out}} = u_{\text{in}} - \frac{2}{\gamma - 1} (c_{\text{II}} - c_{\text{in}}), \quad (3.77)$$

et comme on peut écrire

$$c_{\text{II}} = c_{\text{in}} \left(\frac{p_{\text{out}}}{p_{\text{in}}} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}}, \quad (3.78)$$

on obtient l'expression de la vitesse de l'état extérieur

$$u_{\text{out}} = u_{\text{in}} - \frac{2}{\gamma - 1} c_{\text{in}} \left(\left(\frac{p_{\text{out}}}{p_{\text{in}}} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} - 1 \right). \quad (3.79)$$

Nous sommes conscients que cette méthode n'est pas tout à fait exacte pour notre système diphasique. En effet, pour être totalement rigoureux, il faudrait calculer les invariants de Riemann du système complet. À cause du problème d'hyperbolicité, ces invariants de Riemann sont complexes et les calculs sont impossibles. Nous avons donc dû découpler les deux phases et considérer que seul le gaz pénètre dans le domaine. L'alternative que nous proposons est de considérer les invariants de Riemann associés aux équations d'Euler pour la phase gazeuse et d'appliquer une condition de type paroi à la phase solide.

La définition de la condition aux limites de type entrée subsonique est donc complétée par l'expression de la vitesse de l'état extérieur u_{out} donnée par (3.79).

3.6 Tests numériques

Nous présentons maintenant des tests numériques afin de valider pas à pas notre approche. Ces tests n'ont pas forcément de signification physique mais permettent d'observer le comportement du code lorsqu'il est confronté à plusieurs configurations d'ondes différentes. Les résultats qui sont présentés sont issus de simulations réalisées sur des maillages 1D ou 2D (la présentation de simulations 3D se fera au dernier chapitre). Pour comparer les solutions 1D et 2D, on parlera de solution 2D moyennée sur une section qui s'écrit

$$W_{2D,\text{moy}}(x_1, t) = \frac{1}{A(x_1)} \int_S W_{2D}(x_1, x_2, x_3, t) dS \quad (3.80)$$

où $A(x_1)$ est la surface de la section S au point x_1 , $W_{2D}(x_1, y_1, z_1, t)$ la solution 2D et $W_{2D,\text{moy}}(x_1, t)$ la solution 2D moyennée.

Notre approche consiste à toujours résoudre les équations tridimensionnelles de notre modèle. La dimension du problème est déterminée par la construction du maillage : sous l'hypothèse d'un écoulement axisymétrique, on peut résoudre un problème en deux dimensions d'espace, et en ne considérant qu'une seule cellule suivant le rayon, on se retrouve dans un cas monodimensionnel. Des exemples de maillages sont donnés dans la figure A.2 de l'annexe A page 181. On calcule les vitesses suivant les trois directions de l'espace quelque soit la dimension du problème, mais les vitesses suivant \vec{y} et \vec{z} restent nulles si le maillage est de dimension 1. Par cette méthode, nous sommes en mesure de résoudre les mêmes équations indépendamment de la dimension du problème, et de traiter des cas où la section varie de manière continue ou non.

Nous cherchons dans un premier temps à valider le schéma numérique sur des cas tests monophasiques (uniquement du gaz) dans plusieurs buts :

1. comparer les solutions 1D et 2D moyennées pour des sections constantes. Les solutions doivent être identiques en l'absence de phénomènes géométriques liés à la variation de section ;
2. comparer les solutions de la méthode "directe", c'est-à-dire en utilisant le schéma numérique HLL directement sur le système de loi de conservation de départ, et la méthode à pas fractionnaires ;

Lorsque nous sommes dans ce régime monophasique, le système de loi de conservation revient à considérer le système d'équations d'Euler, donc hyperbolique et conservatif. La plupart de ces tests sera présentée dans l'annexe B page 187.

Dans un second temps, nous étudions des cas tests toujours monophasiques mais à variation de section discontinue. On compare les solutions 1D et 2D moyennées de problèmes de Riemann à des solutions dites exactes selon les auteurs (proposées dans [AW04]) pour des écoulements compressibles monophasiques. On observera à cette occasion la limite d'une comparaison entre deux approches totalement différentes. La section discontinue apparaît à l'endroit où l'allumeur s'arrête dans la chambre de combustion.

On valide ensuite notre schéma numérique pour des cas tests d'écoulements à deux phases non réactifs. Les termes sources qui modélisent les transferts de masse et d'énergie issus de la combustion ne sont pas pris en compte pour l'instant. Comme notre système de loi de conservation n'est pas inconditionnellement hyperbolique, pour des maillages suffisamment fins nous observons des oscillations intrinsèques à notre modèle lorsqu'on utilise la méthode directe. On démontre ici l'apport de stabilité de notre méthode à pas fractionnaires.

Enfin, la dernière étape sera de valider le traitement de la paroi mobile et de la variation de section continue en confrontant nos simulations de déplacement de piston à des résultats issus d'un programme déjà validé et utilisé à l'ISL utilisant la méthode des caractéristiques [Kra83].

3.6.1 Tests monophasiques à section constante

Comme indiqué précédemment, ces tests ont pour but de valider notre approche en résolvant des problèmes simples en une et deux dimensions d'espace, afin de pouvoir comparer les solutions pour différents maillages ainsi que pour les différentes méthodes de résolution. Nous focaliserons notre étude sur le problème de Riemann décrit par le tableau 3.1. L'état à gauche de l'interface est représenté par l'indice L tandis que l'état à droite est représenté par l'indice R. D'autres cas tests sont présentés dans l'annexe B à la page 187. On utilise un

ρ_L	u_L	p_L	ρ_R	u_R	p_R
10	0	100	1	0	1

TAB. 3.1 – Problème de Riemann monophasique à section constante

maillage de 1000 mailles pour le cas 1D et 1000×10 mailles pour le cas 2D. La simulation s'arrête lorsqu'on atteint 0.09 s. La figure 3.5 illustre les solutions 1D exacte, 1D numérique et 2D moyennée, en utilisant la méthode directe. On observe une parfaite adéquation entre les solutions 1D et 2D moyennée. Ces solutions approchent correctement la solution exacte donnée par un solveur de Riemann exact. On cherche maintenant à comparer les résultats donnés par la méthode directe et par la méthode à pas fractionnaires sur le même problème de Riemann. La taille du maillage monodimensionnel est tout d'abord fixée à 500 cellules pour pouvoir observer la différence entre les deux méthodes. Le temps final est toujours 0.09

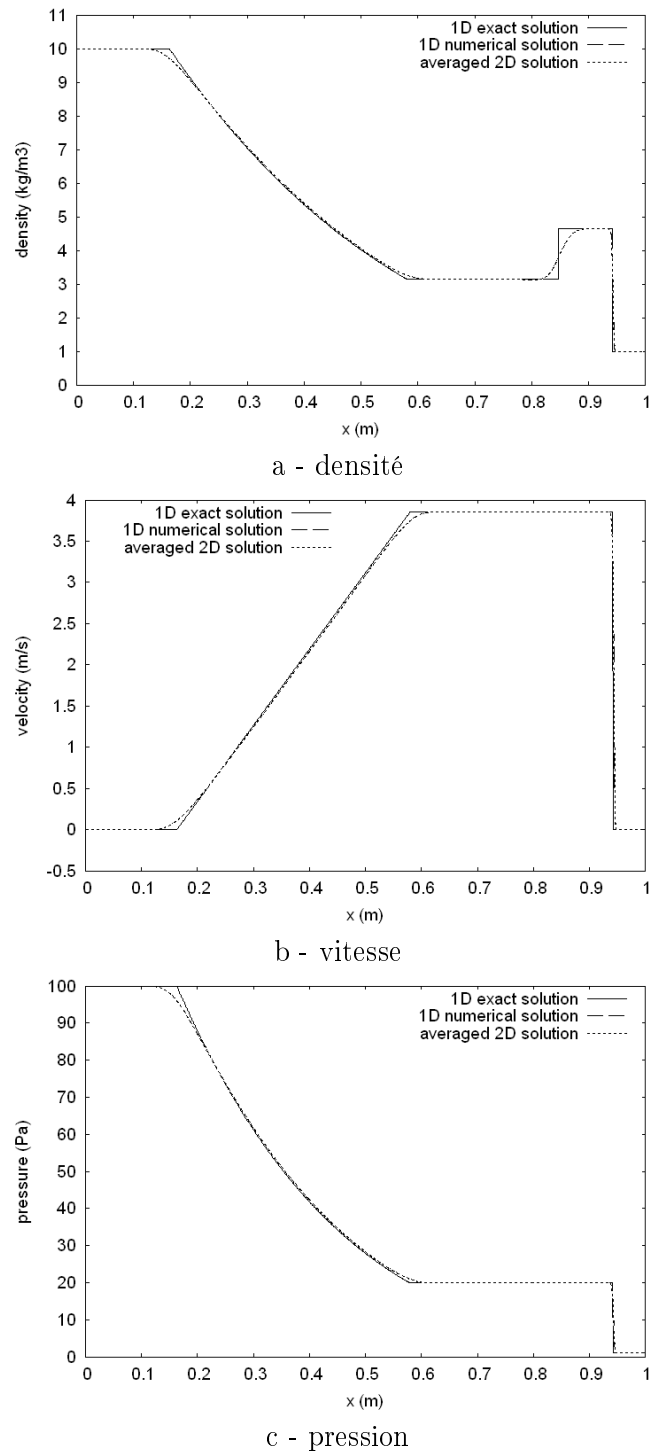


FIG. 3.5 – Comparaison des solutions pour différents maillages

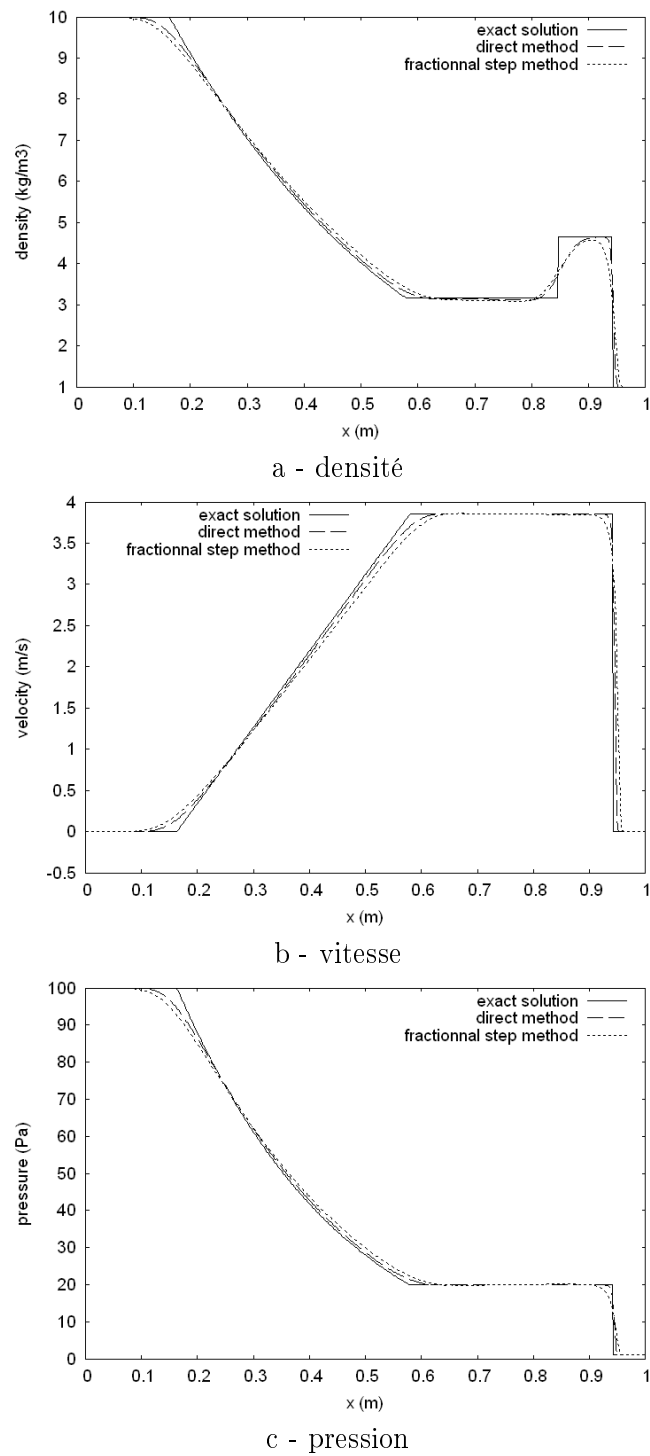


FIG. 3.6 – Solutions pour chaque méthode sur un maillage de 500 cellules

s. Les résultats sont donnés par la figure 3.6.

Les résultats pour la méthode à pas fractionnaires sont moins précis, sans doute sous l'influence de la viscosité numérique qui doit être plus forte. En effet, comme à chaque pas de temps on résout successivement chacun des deux sous-systèmes hyperboliques, il est tout à fait possible que la viscosité numérique totale (sur un pas de temps) soit plus importante que dans le cas d'une résolution directe du système général.

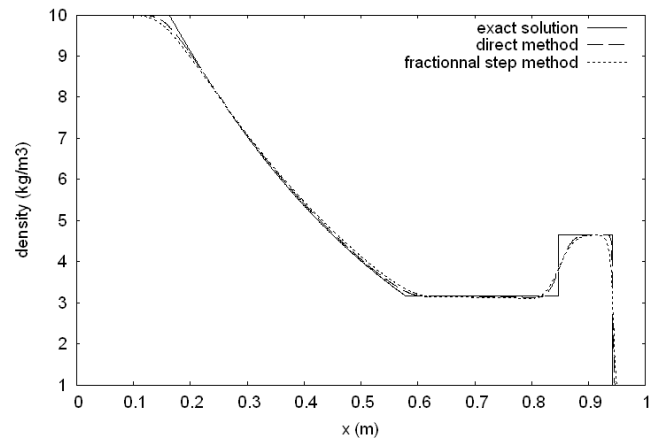
On constate que lorsqu'on raffine le maillage, à 1000 cellules par exemple, la précision des résultats devient équivalente (figure 3.7).

3.6.2 Tests monophasiques à variation de section discontinue

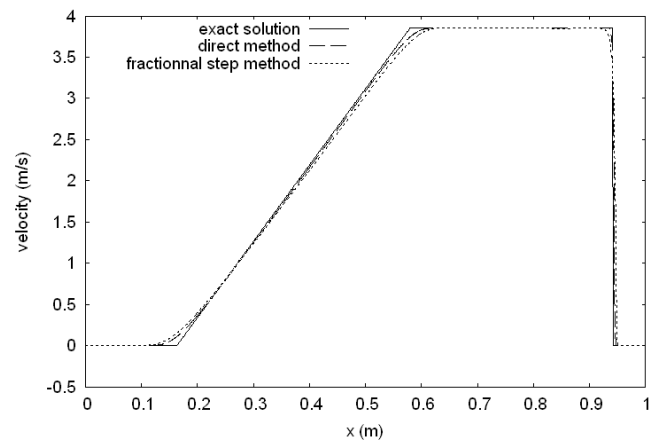
On considère maintenant différents problèmes de Riemann dans une tuyère à section discontinue. On utilise un maillage de 1000 cellules pour les simulations 1D et de dimension 200×100 pour les simulations 2D. A_k représente la section, $k = L$ l'état initial à gauche de la discontinuité de la section et $k = R$ l'état initial droit. On compare nos solutions numériques à celles données dans [AW04]. Les deux approches étant différentes (équations 1D à section variable chez Andrianov et Warnecke, équations 3D sur maillages particuliers dans notre cas), nous observons des différences entre les solutions.

Nous reprenons l'expression "solution exacte" utilisée dans [AW04] pour désigner la solution donnée par Andrianov et Warnecke, même si elle ne correspond pas à la solution exacte au sens général du terme mais au sens des équations 1D. À partir des équations d'Euler pour des écoulements compressibles en tuyères à section variable, un des systèmes non-conservatifs les plus simples, ils étudient les caractéristiques du modèle, puis introduisent la notion de solution faible pour le problème de Riemann. La définition de solution faible à partir de la théorie des lois de conservation n'est pas utilisable dans le cas des systèmes non conservatifs précisément à cause de la présence des termes non conservatifs. Pourtant, pour le cas particulier du problème de Riemann pour les équations d'Euler en tuyère, le système d'équations est localement équivalent à certains systèmes conservatifs. D'où la définition d'une solution faible correspondante. La solution n'étant en général pas unique, Andrianov et Warnecke utilisent le résultat de simulations 2D pour choisir la solution physiquement admissible, ce qui revient, selon les auteurs, à satisfaire un critère d'admissibilité sur l'entropie en analogie avec Dafermos [Daf73]. Selon leurs expériences numériques, cette solution correspond à un taux de dissipation d'entropie maximal. De notre point de vue, il a parfois été difficile d'identifier une solution 2D moyennée par rapport à une solution 1D.

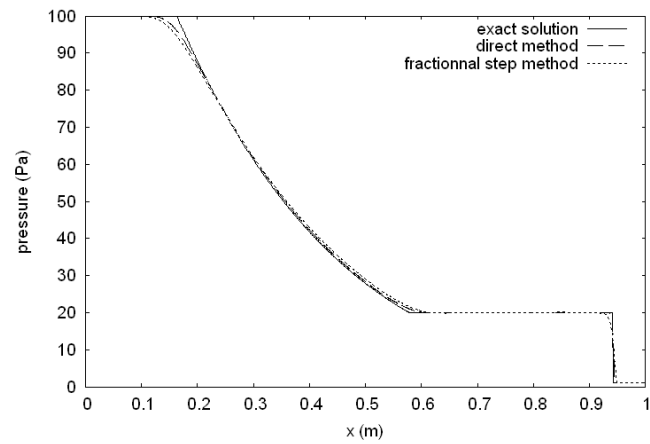
Si on compare les différentes approches de ce problème, celle qui paraît la plus réaliste est la solution 2D moyennée, car elle tient compte de tous les effets dimensionnels possibles. L'avantage de travailler avec un maillage en trois dimensions d'espace permet de tenir compte des effets de pression sur la face supplémentaire qu'engendre la discontinuité de la section, même si on ne considère que le problème unidimensionnel.



a - densité



b - vitesse



c - pression

FIG. 3.7 – Solutions pour chaque méthode sur un maillage de 1000 cellules

Premier problème de Riemann

Les conditions initiales sont données dans le tableau 3.2.

A_L	ρ_L	u_L	p_L	A_R	ρ_R	u_R	p_R
0.3	0.2	3.3	1	0.8	0.2	-4	0.07

TAB. 3.2 – 1^{er} problème de Riemann

Le domaine de calcul est $([0, 1] \times [0, 0.8]) \setminus ([0, 0.5] \times [0, 0.5])$. Les solutions à $t = 0.2$ s sont tracées sur la figure 3.8.

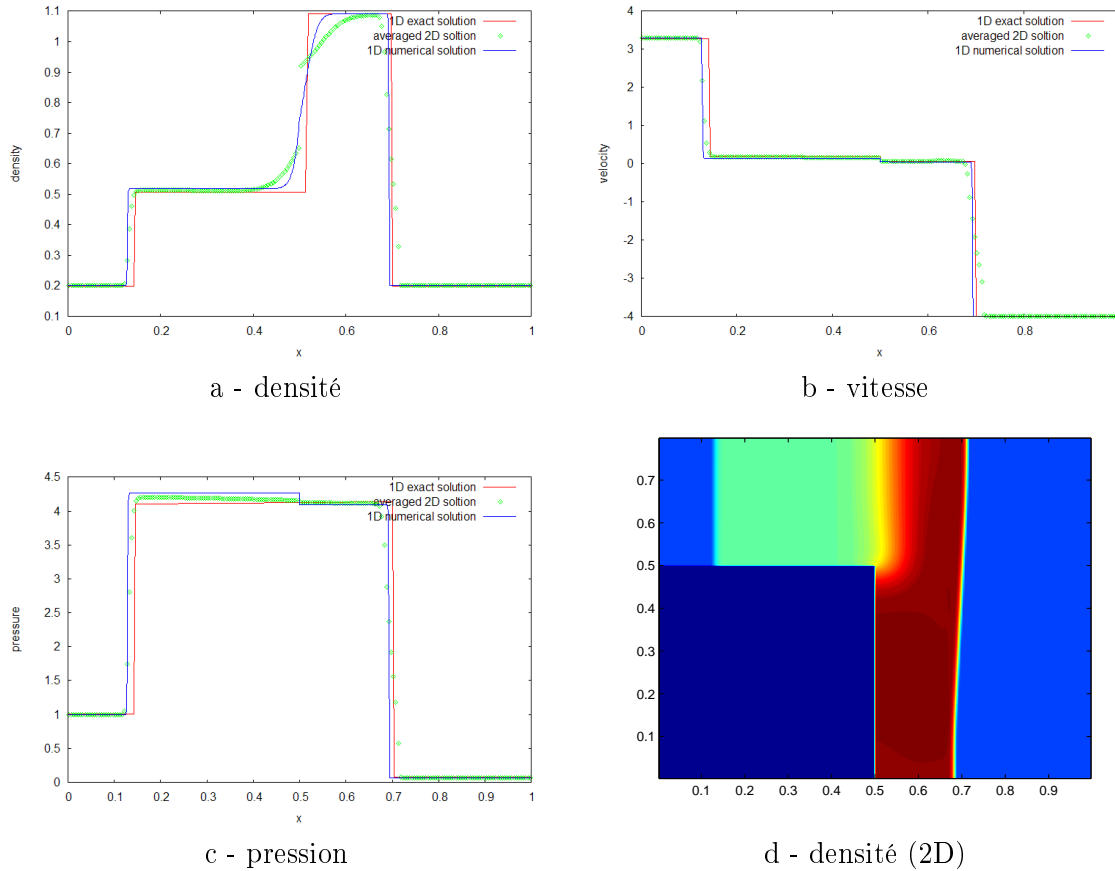


FIG. 3.8 – Solutions du 1^{er} problème de Riemann.

La solution exacte correspond à la configuration B de [AW04]. Il y a un très bon accord entre les solutions.

Second problème de Riemann

Les conditions initiales sont données dans le tableau 3.3.

A_L	ρ_L	u_L	p_L	A_R	ρ_R	u_R	p_R
0.8	0.2069	3.0	0.2	0.3	0.1354	-3.1666	0.0833

TAB. 3.3 – 2nd problème de Riemann.

Le domaine de calcul est $([-1, 0] \times [0, 0.8]) \setminus ([-0.5, 0] \times [0, 0.5])$. Les solutions à $t = 0.3$ s sont tracées sur la figure 3.9.

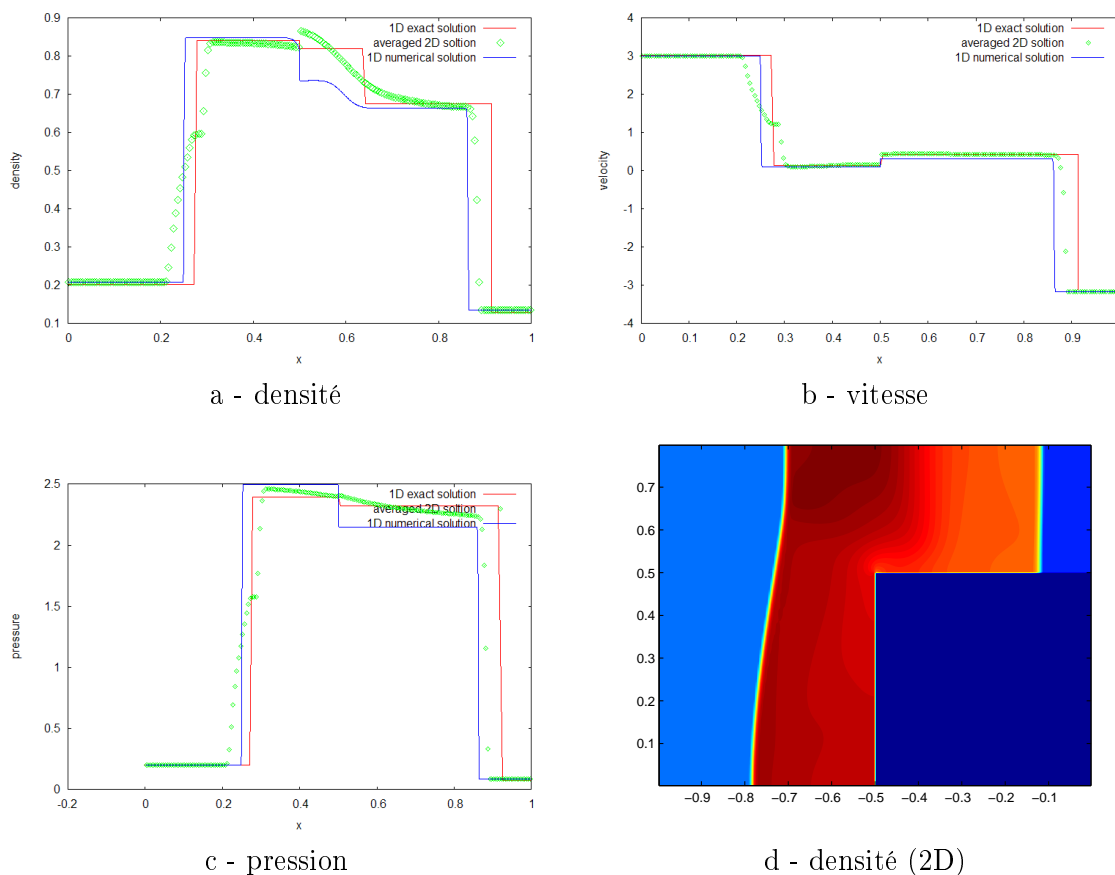


FIG. 3.9 – Solutions du 2nd problème de Riemann.

On observe une différence entre les solutions au niveau du second choc. Cette différence peut s'expliquer par le fait que les auteurs de [AW04] ont utilisé les équations d'Euler classiques monodimensionnelles à section variable, ce qui revient à utiliser l'équation (A.1) comme équation de conservation de la quantité de mouvement. Le terme non conservatif $p \partial_x A$ représentant

la variation de section tend ici vers l'infini, à cause de la discontinuité de A . Or notre solution 1D est en fait une solution 3D mais avec une seule maille dans le sens \vec{y} . Cela pourrait expliquer pourquoi nos résultats sont différents. Les effets de la pression sur la face verticale de la marche sont complètement négligés tandis que notre maillage tridimensionnel en tient compte.

Troisième problème de Riemann

Les conditions initiales sont données dans le tableau 3.4. Ce problème est appelé test de *forward-facing step* ou *Mach 3 wind tunnel with step* [WC84]. Ce test numérique est délicat car la pression et la densité peuvent devenir négatives [AW04], [WC84] pour certains schémas numériques. De plus, le choc qui se forme en amont de la marche se réfléchit plusieurs fois contre les parois du tunnel.

A_L	ρ_L	u_L	p_L	A_R	ρ_R	u_R	p_R
1	1.4	3	1	0.8	1.4	3	1

TAB. 3.4 – 3 problème de Riemann.

Le domaine de calcul est $([0, 10] \times [0, 1]) \setminus ([0.6, 10] \times [0, 0.2])$. On utilise cette fois un maillage plus fin de dimension 800×100 . Les solutions à $t = 2$ s sont tracées sur la figure 3.10.

Nos solutions pseudo-1D et 2D sont cohérentes entre elles même si elles peuvent différer entre certaines réflexions. Par contre on note que les solutions 1D données par Andrianov et Warnecke sont très éloignées des nôtres. On atteint la limite de validité de la comparaison entre les deux méthodes. Dans [AW04], on observe également une nette différence entre la solution 1D et la solution 2D moyennée. Nos solutions sont proches de leur solution 2D. Il est également satisfaisant de constater que la pression et la densité soient restées positives pendant la simulation, preuve de la robustesse de notre schéma numérique HLL.

Remarque 20: Le tracé de la densité 3.11.a et surtout du gradient de la densité (3.11.b et 3.11.c en couleurs saturées) permet de bien observer la réflexion du choc sur les parois.

3.6.3 Test à variation de section continue et à paroi mobile

Après avoir validé notre code sur des cas tests monophasiques à section constante ou à variation de section discontinue, on propose ici un cas test de validation pour les variations de section continues. Le but est de comparer les solutions 1D et 2D moyennées entre elles, ainsi que les confronter à des résultats obtenus à partir de simulations exécutées par un autre code de calcul. Par cette même occasion, on veut démontrer que notre algorithme de création de maille pour le traitement de parois mobiles fonctionne correctement. Il est à noter que nous pourrions aussi valider le code en comparant la solution numérique à une solution analytique des équations d'Euler pour un écoulement monophasique en une dimension d'espace dans une tuyère à section variable. La construction de cette solution est proposée dans l'annexe C page 201.

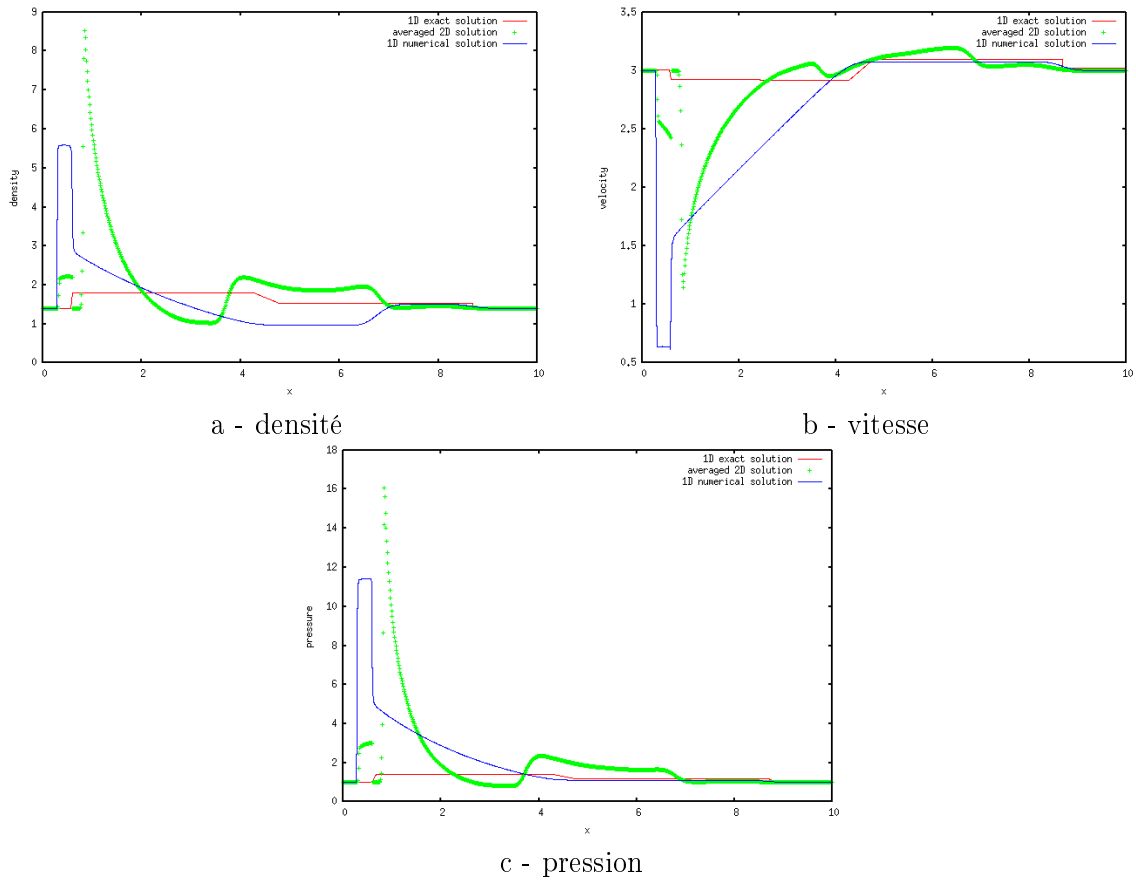
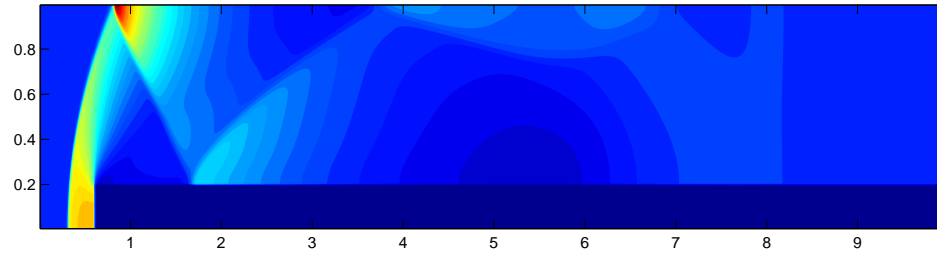
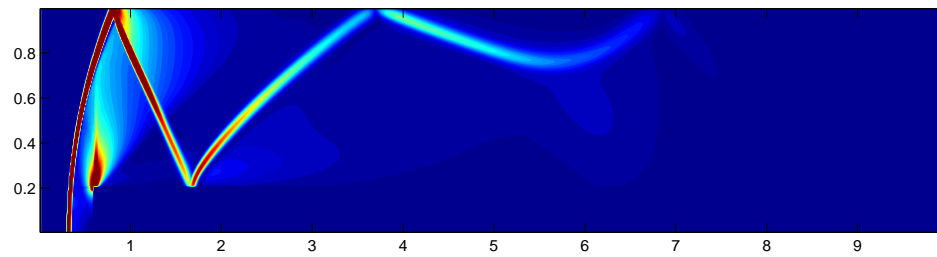


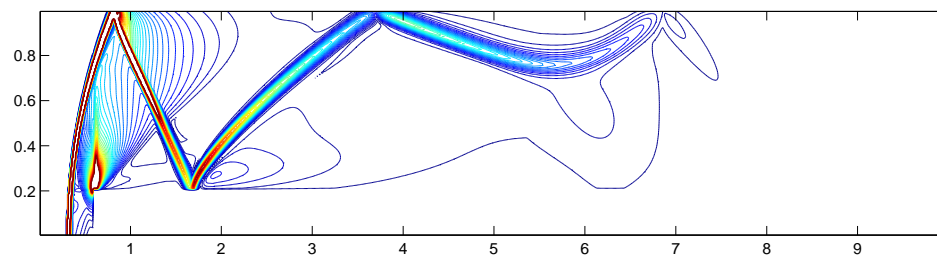
FIG. 3.10 – Solutions du 3^{eme} problème de Riemann.



a - densité (2D)



b - gradient de la densité



c - contour du gradient de la densité

FIG. 3.11 – Densité 2D et gradient (en couleurs saturées) avec réflexion aux bords.

On considère maintenant le problème illustré dans la figure 3.12. Deux volumes sont séparés hermétiquement par un piston. Dans la chambre à gauche, un gaz parfait ($\gamma = 1.405$) est confiné à haute pression et à température ambiante. La paroi de droite est un piston qui peut se déplacer le long du tube. La pression de résistance à l'avancement du piston est constante et fixée à 0.12 MPa. La pression dans la chambre étant nettement plus grande que la pression de résistance, le piston va donc être propulsé vers la droite.

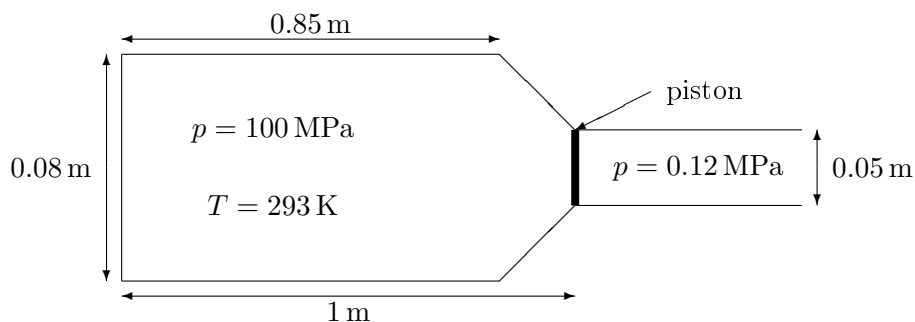


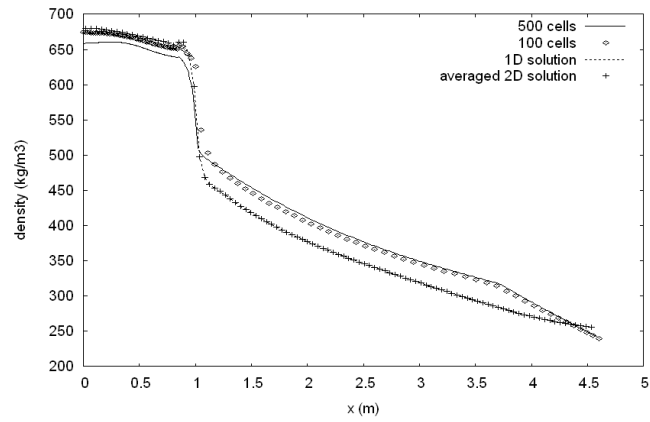
FIG. 3.12 – Géométrie initiale pour le cas du piston

La simulation s'arrête lorsque le piston a parcouru une distance de 3.6 mètres. Notre programme de référence utilise la méthode des caractéristiques appliquée aux équations d'Euler 1D compressibles dans des tuyères à variations de section continues. Il tient également compte du déplacement du piston le long d'un tube à section constante. Ce code est déjà validé et fréquemment utilisé à l'ISL [Kra83]. On effectue deux simulations sur des maillages de 100 et 500 cellules, qu'on compare aux résultats de notre algorithme pour 100 mailles en 1D et 100×10 mailles en 2D. La vitesse finale du piston ainsi que le temps qu'il a mis pour parcourir les 3.6 mètres sont donnés par les codes. Le tableau 3.5 synthétise les résultats.

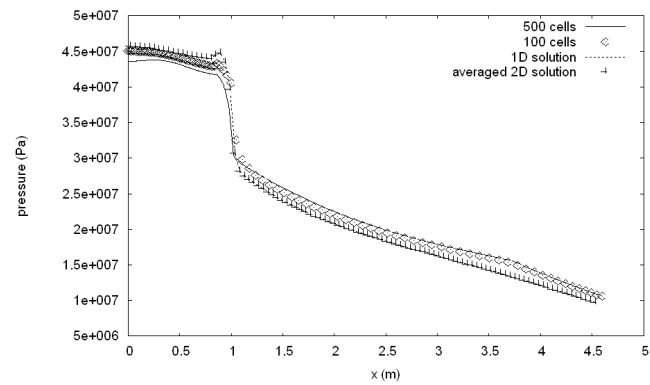
	100 mailles	500 mailles	1D	2D
vitesse (m.s^{-1})	552.2	552.9	552.0	552.9
temps (ms)	9.55	9.35	9.41	9.41

TAB. 3.5 – Vitesses et temps du piston au bout de 3.6 mètres.

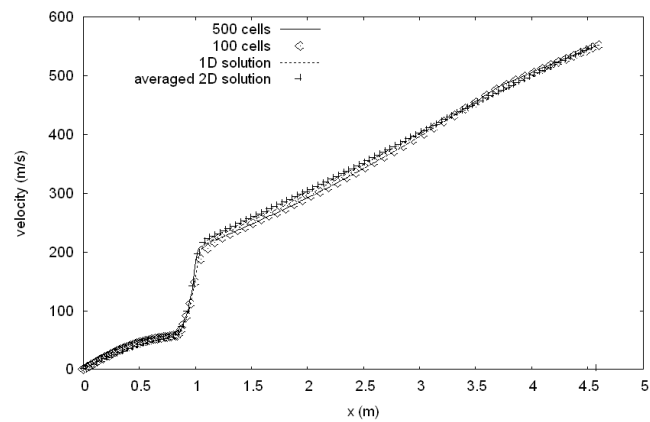
Les résultats sont cohérents et valident notre algorithme non seulement pour la section variable continue, mais aussi pour le maillage mobile. On observe une très bonne concordance entre les profils de la vitesse axiale, de la densité et de la pression, en particulier entre la solution 1D et 2D moyennée (figure 3.13).



a - densité



b - pression



c - vitesse axiale

FIG. 3.13 – Profils des variables à l'intérieur du système.

3.6.4 Tests diphasiques

Jusqu'à présent, les cas tests proposés étaient uniquement dans le cadre monophasique, plus simples du point de vue mathématique car les systèmes associés sont conservatifs et hyperboliques. Cela nous a permis de valider notre approche consistant à traiter tous les problèmes comme des problèmes tridimensionnels sur des maillages particuliers (hypothèse d'axisymétrie, un seul pas de discrétisation suivant le rayon pour les cas 1D et 2D). On a pu également constater l'efficacité de l'algorithme de création de mailles pour pouvoir simuler le déplacement d'une paroi mobile.

Les tests qui suivent sont maintenant diphasiques, c'est-à-dire qu'on considère un mélange de gaz et de poudre au lieu d'un gaz seul. La présence des deux phases induit la présence de termes non conservatifs délicats à traiter, comme expliqué page 74. L'objectif de ces tests diphasiques est double :

1. valider le calcul des contributions des termes convectifs non conservatifs à l'aide de notre schéma numérique adapté ;
2. justifier l'utilisation de la méthode à pas fractionnaires par l'apport d'une stabilité supplémentaire par rapport à la méthode directe.

Le premier cas test est la discontinuité de contact diphasique, déjà simulé dans le premier chapitre. Ce test est classique pour valider un schéma numérique appliqué aux écoulements à deux phases. Souvent, dans ce type de calcul, apparaissent des oscillations de la pression numérique aux interfaces entre les fluides. Il est également difficile numériquement de conserver la vitesse constante. Concernant l'hyperbolicité du système associé, nous sommes dans la configuration où la contrainte intergranulaire est nulle mais les vitesses sont égales (et constantes). Par conséquent, la condition d'hyperbolicité est toujours vérifiée.

Le deuxième cas test est un tube à choc diphasique. Contrairement au test précédent, nous sortons du domaine d'hyperbolicité du système. En faisant varier les paramètres de calcul, nous justifions l'utilisation du schéma numérique HLL ainsi que l'apport de stabilité obtenu grâce à la méthode à pas fractionnaires.

Discontinuité de contact diphasique

On effectue la même simulation que dans le premier chapitre, à savoir un écoulement à pression et vitesse constante dans lequel on introduit une discontinuité de porosité et de densité. Aucune interaction entre les phases n'est prise en compte et la contrainte intergranulaire est considérée comme nulle. Le problème de Riemann associé est décrit dans le tableau 3.6. Souvent, dans ce type de calcul, apparaissent des oscillations numériques qui ne sont absolu-

	α_1	ρ_1	ρ_2	u_1	u_2	p_1	p_2
État gauche	0.5	0.871	1587	100	100	10^5	10^5
État droit	0.8	0.512	1587	100	100	10^5	10^5

TAB. 3.6 – Conditions initiales pour le cas de la discontinuité de contact

ment pas physiques et peuvent conduire, dans les cas les plus défavorables, à des arrêts du calcul lorsque la vitesse du son devient imaginaire dans une des phases (dans notre cas la phase gazeuse).

Du point de vue de l'hyperbolicité, le système associé est hyperbolique tant que la vitesse relative entre les phases reste nulle, ce qui est le cas tout le long de la simulation. On démontre cette propriété : en dimension 1 d'espace, on considère l'équation de conservation de la masse de gaz

$$(\alpha_1 \rho_1)_t + (\alpha_1 \rho_1 u_1)_x = 0 \quad (3.81)$$

et l'équation de conservation de la quantité de mouvement du gaz

$$(\alpha_1 \rho_1 u_1)_t + (\alpha_1 (\rho_1 u_1^2 + p_1))_x - p_1 \alpha_{1,x} = 0 \quad (3.82)$$

qu'on peut développer sous l'hypothèse d'une solution régulière

$$u_1 (\alpha_1 \rho_1)_t + \alpha_1 \rho_1 u_{1,t} + u_1 (\alpha_1 \rho_1 u_1)_x + \alpha_1 \rho_1 u_1 u_{1,x} + (\alpha_1 p_1)_x - p_1 \alpha_{1,x} = 0. \quad (3.83)$$

En utilisant (3.81), on réécrit (3.83) sous la forme

$$u_{1,t} + u_1 u_{1,x} + \frac{1}{\rho_1} p_{1,x} = 0. \quad (3.84)$$

On considère maintenant l'équation de conservation de l'énergie pour la phase gazeuse

$$(\alpha_1 E_1)_t + (\alpha_1 u_1 (E_1 + p_1))_x + p_1 (\alpha_2 u_2)_x = 0. \quad (3.85)$$

En utilisant la loi des gaz parfaits afin de simplifier les calculs, on peut réécrire l'équation précédente pour obtenir

$$\frac{1}{\gamma - 1} ((\alpha_1 p_1)_t + (\alpha_1 u_1 p_1)_x) + p_1 (\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2)_x = 0. \quad (3.86)$$

qui s'écrit également

$$\alpha_1 (p_{1,t} + u_1 p_{1,x}) + p_1 (\alpha_{1,t} + (\alpha_1 u_1)_x) + p_1 (u_{1,x} + (\alpha_2 (u_2 - u_1))_x) = 0. \quad (3.87)$$

L'équation bilan de quantité de mouvement pour la phase gazeuse peut s'écrire

$$u_{2,t} + u_2 u_{2,x} + \frac{1}{\rho_2} p_{2,x} + \frac{p_1 - p_2}{\alpha_2 \rho_2} \alpha_{1,x} = 0, \quad (3.88)$$

modulo les équations bilan de masse pour chacune des phases. Une solution triviale des équations bilan de quantité de mouvement pour la phase gazeuse (3.84) et la phase solide (3.88) est

$$\begin{cases} p_1(x, t) = p_2(x, t) = p_0, \\ u_1(x, t) = u_2(x, t) = u_0, \end{cases} \quad (3.89)$$

où u_0 et p_0 sont les conditions initiales (constantes suivant x). L'équation bilan d'énergie du gaz (3.87) devient alors

$$\begin{aligned} \alpha_{1,t} + (\alpha_1 u_1)_x = 0 & \Leftrightarrow -\alpha_{2,t} + (\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2 - \alpha_2 u_2)_x = 0 \\ & \Leftrightarrow -\alpha_{2,t} - (\alpha_2 u_2)_x + (\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2)_x = 0 \\ & \Leftrightarrow (\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2)_x = 0 \end{aligned} \quad (3.90)$$

ce qui est vrai.

Par conséquent, les pressions et les vitesses doivent rester constantes pendant la simulation. Ces états constants doivent être préservés par notre schéma numérique. Pourtant, nous avons observé que les solutions numériques pour les pressions et les vitesses étaient proches des états initiaux mais pas rigoureusement identiques. Cette légère variation s'explique par le fait que les gradients des termes non conservatifs de notre système contiennent les fractions volumiques α_k , $k = 1, 2$. La diffusion du schéma entraîne des erreurs dans le calcul qui se répercutent ensuite sur l'ensemble des résultats. Dans notre cas, une façon d'améliorer les résultats a été de transformer les termes non conservatifs pour ne faire figurer dans les gradients que les termes de pressions et de vitesse de la façon suivante

$$\begin{aligned} p_1 \alpha_{k,x} &= (p_1 \alpha_k)_x - \alpha_k p_{1,x}, \\ p_1 (\alpha_2 u_2)_x &= (p_1 \alpha_2 u_2)_x - \alpha_2 u_2 p_{1,x}. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Les termes conservatifs apparus au cours de l'opération sont intégrés dans les flux conservatifs, et l'expression du système d'équations se trouve modifiée, sans que sa nature mathématique (hyperbolicité) en soit changée.

Les simulations sont effectuées sur un maillage 1D de 1000 cellules pour une durée de 3 ms. La géométrie du problème ne proposant pas de variation de section, il n'est pas nécessaire d'utiliser de maillages 2D. La fraction volumique de gaz est tracée dans la figure 3.14 pour la méthode directe et la méthode à pas fractionnaires. On observe encore le diffusion plus grande de la méthode à pas fractionnaires.

Tube à choc diphasique

On considère le cas test d'un tube à choc diphasique dont les conditions initiales sont données dans le tableau 3.7. La densité de la poudre reste constante et est fixée à $1578 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Le domaine de calcul est à section constante et le temps final est fixé à 0.15 ms. La CFL est égale à 0.5.

Le but de ce cas test est d'étudier le comportement des deux méthodes ainsi que du schéma numérique lorsque le système est dans une configuration non hyperbolique. Afin de s'assurer de sortir de la poche d'hyperbolicité, on considère la contrainte intergranulaire comme nulle. Le terme de traînée qui tend à réduire la vitesse relative entre chaque phase et qui joue un rôle stabilisateur des oscillations numériques n'est d'abord pas pris en compte.

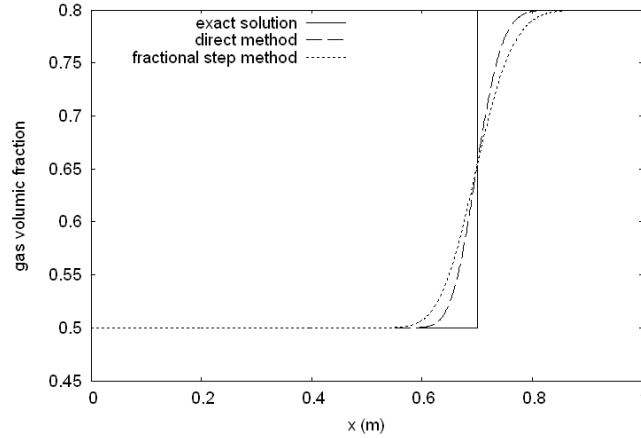


FIG. 3.14 – Fraction volumique de gaz : solution numérique pour chaque méthode.

$\alpha_{1,L}$	$\rho_{1,L}$	$u_{1,L}$	$u_{2,L}$	$p_{1,L}$	$\alpha_{1,R}$	$\rho_{1,R}$	$u_{1,R}$	$u_{2,R}$	$p_{1,R}$
0.5	1	0	0	10^6	0.6	0.3	0	0	10^5

TAB. 3.7 – Conditions initiales : tube à choc diphasique.

Dans un premier temps, on effectue les simulations sur un maillage de 1000 mailles sans force de traînée. On représente dans la figure 3.15 les courbes de la fraction volumique de gaz α_1 , de la densité du gaz ρ_1 et des vitesses u_1 et u_2 de chaque phase. Les résultats sont stables et cohérents entre eux.

Des oscillations numériques causées par la non hyperbolicité du système doivent apparaître pour la méthode directe lorsque le maillage devient suffisamment fin. On effectue la même simulation sur un maillage de 5000 cellules. On constate bien sur la figure 3.16 que l'algorithme de la méthode à pas fractionnaires reste stable tandis que les solutions données par la méthode directe sont perturbées par des instabilités.

Le schéma numérique HLL, grâce à sa forte viscosité numérique, reste stable sur maillage grossier même dans les cas non hyperboliques. Lorsque le pas de discrétisation en espace est suffisamment petit, la viscosité numérique ne suffit plus à stabiliser les oscillations numériques qui se développent alors et le schéma devient instable. Avec un schéma plus précis (ou d'ordre plus élevé), ces oscillations apparaîtraient encore plus rapidement.

Les solutions obtenues par la méthode à pas fractionnaires restent stables sur des maillages légèrement plus fins que celles données par la méthode directe. L'hyperbolicité des deux sous-systèmes résolus successivement repousse l'explosion de la solution, mais comme le modèle général n'est pas inconditionnellement hyperbolique, il existera toujours un raffinement de maillage limite au-delà duquel la solution ne convergera plus.

La simulation suivante est effectuée sur un maillage de 5000 cellules mais en tenant compte cette fois-ci de la force de traînée. La traînée D réduit la vitesse relative entre les phases

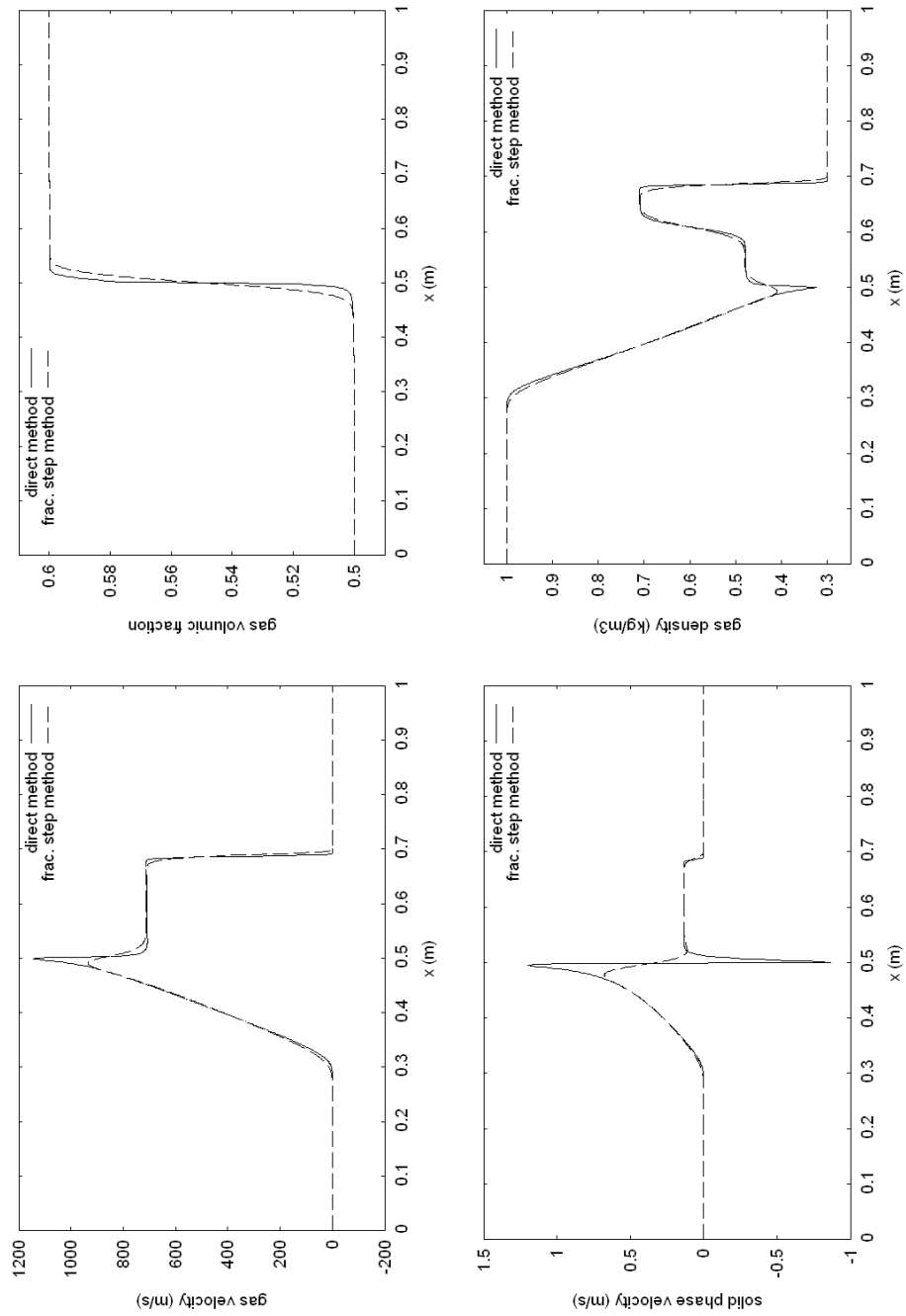


FIG. 3.15 – Tube à choc diphasique, 1000 mailles.

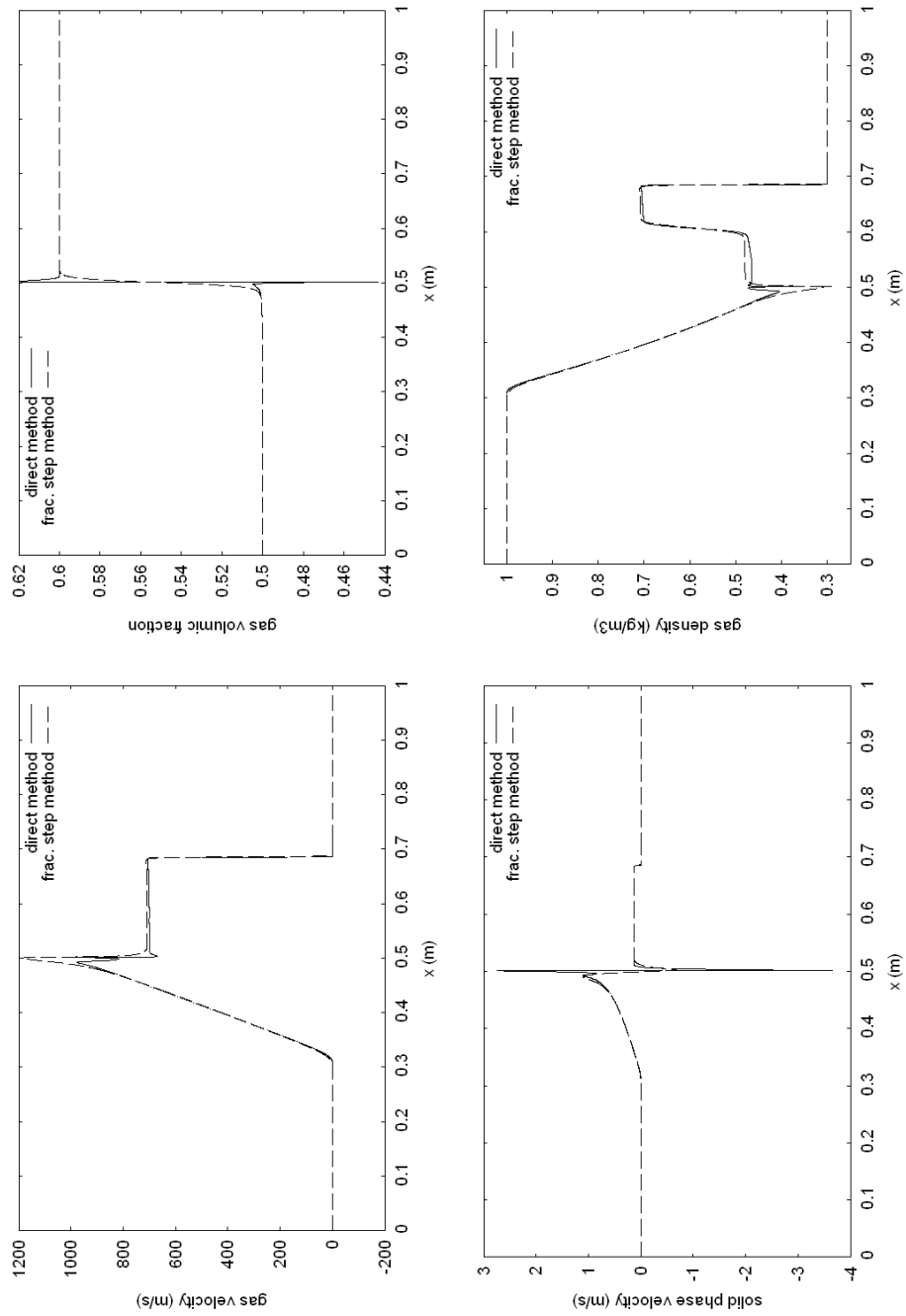


FIG. 3.16 – Tube à choc diphasique, 5000 mailles.

et stabilise (au niveau des termes différentiels d'ordre 0) le modèle. On utilise une limite du modèle empirique d'Ergun [Erg52] déjà décrit dans le chapitre 1 dont on rappelle l'expression

$$D = \frac{\varphi(\alpha_2)}{6} \rho_2 (1 - \alpha_1) \frac{S_p}{V_p} (u_1 - u_2) |u_1 - u_2|$$

avec

$$\varphi(\alpha_2) = \begin{cases} 0.3 & \alpha_1 \geq 0.9, \\ 1.75 \left(\frac{1-\alpha_1}{\alpha_1} \frac{\alpha_c}{1-\alpha_c} \right)^{0.45} & \alpha_c < \alpha_1 < 0.9, \\ 1.75 & \alpha_1 \leq \alpha_c. \end{cases}$$

En utilisant les notations du premier chapitre, S_p et V_p sont respectivement les surface et volume spécifique des grains (dépendant de leur forme, dans notre cas des cylindres pleins) et α_c la porosité critique, fixée ici à 0.1 pour avoir une contrainte intergranulaire nulle.

La figure 3.17 illustre les résultats pour les deux méthodes. Les solutions sont cohérentes et stables. La traînée a donc contribué à stabiliser la méthode directe.

Enfin, on veut mettre en évidence numériquement l'influence de la contrainte intergranulaire $\Lambda(\alpha_2, \rho_2)$ sur le domaine d'hyperbolicité du modèle général. On rappelle que les conditions d'hyperbolicité (ou d'ellipticité en temps) sont données par

1. $c_2 = 0, u_1 = u_2$: le système est hyperbolique ;
2. $c_2 = 0, u_1 \neq u_2, -1 \leq \frac{u_2 - u_1}{c_1} \leq 1$: le système n'est pas hyperbolique ;
3. $0 < c_2 < c_1, |u_2 - u_1| \leq \max(c_2, c_1 - c_2)$: le système est hyperbolique.

On simule le cas test précédent pendant un temps très court 0.02 ms sur un maillage de 1000 cellules. La première simulation est effectuée sans contrainte intergranulaire, ce qui implique que $c_2 = 0$ pendant tout le calcul. On se trouve alors dans les cas 1 ou 2. Les vitesses initiales des phases étant égales, les zones au bord du domaine où les états initiaux n'ont pas encore été perturbés par les ondes restent dans la poche d'hyperbolicité. Il est intéressant de se concentrer sur la zone où $u_1 \neq u_2$. Les courbes de la figure 3.18 représentent la vitesse du son dans le gaz c_1 et la vitesse relative $|u_r| = |u_2 - u_1|$. On observe que dans la zone perturbée ($u_r \neq 0$), on a $u_r < c_1$ et donc $\frac{u_r}{c_1} < 1$ et la condition d'ellipticité est vérifiée.

On tient compte maintenant de la contrainte intergranulaire, dont on rappelle l'expression donnée précédemment par (3.11)

$$\Lambda(\alpha_2, \rho_2) = \begin{cases} 0 & \text{si } \alpha_2 < 1 - \alpha_c, \\ \frac{\rho_2 c_l^2 \alpha_c (\alpha_c + \alpha_2 - 1)}{\alpha_2 (1 - \alpha_2)} & \text{si } \alpha_2 \geq 1 - \alpha_c. \end{cases} \quad (3.92)$$

On fixe $c_l = 100 \text{ m.s}^{-1}$ et $\alpha_c = 0.61$. Pendant la simulation, on a toujours $\alpha_1(x, t) \leq 0.6 \forall x \in [0, 1], t \in [0, 2 \cdot 10^{-5}]$, d'où $\alpha_1 < \alpha_c$ pendant toute la simulation. Par conséquent, on aura $\lambda(\alpha_2, \rho_2) > 0 \forall x \in [0, 1], t \in [0, 2 \cdot 10^{-5}]$, et donc $c_2 \neq 0$, ce qui nous conduit à étudier le troisième cas. Sur la figure 3.19 sont tracées la vitesse du son dans la phase solide c_2 , la vitesse relative $|u_r|$ et la différence des vitesses du son $c_1 - c_2$. On remarque que $\max(c_2, c_1 - c_2) = c_1 - c_2$ et qu'on a toujours $|u_2 - u_1| \leq c_1 - c_2$. La troisième condition d'hyperbolicité est donc vérifiée.

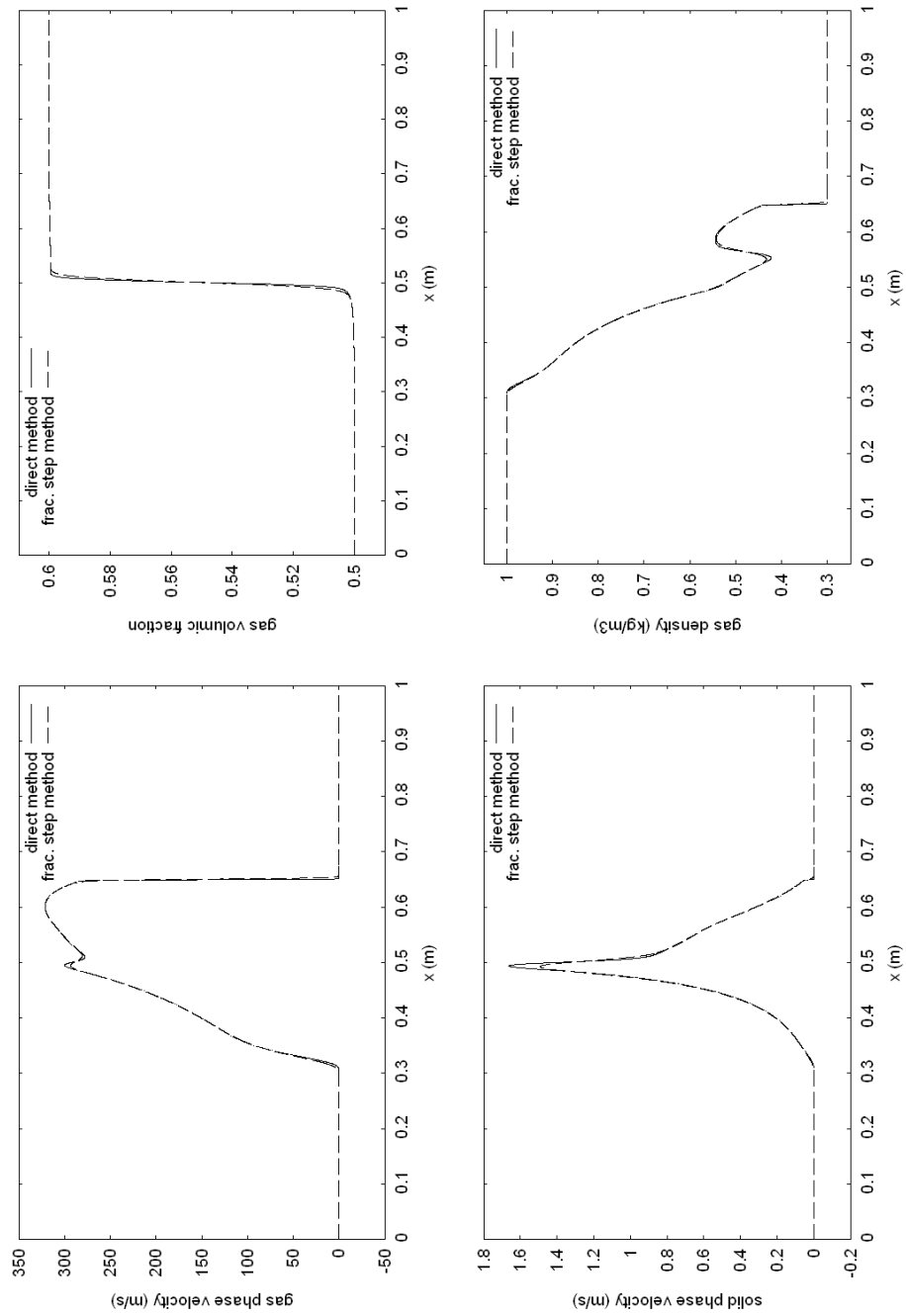


FIG. 3.17 – Tube à choc diphasique avec traînée, 5000 mailles.

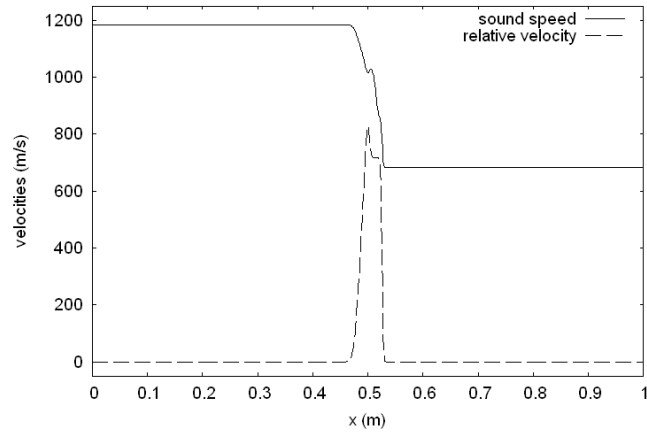


FIG. 3.18 – Tube à choc diphasique avec $\Lambda(\alpha_2, \rho_2) = 0$: vitesses dans la phase gazeuse.

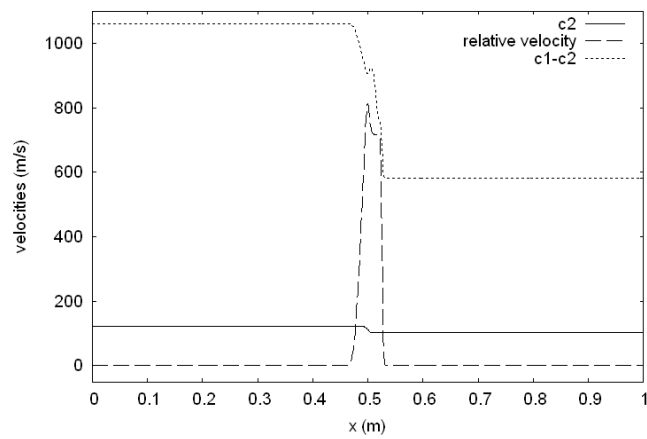


FIG. 3.19 – Tube à choc diphasique avec $\Lambda(\alpha_2, \rho_2) \neq 0$: vitesses dans la phase gazeuse.

La présence de la contrainte intergranulaire contribue bien à stabiliser le modèle en augmentant le domaine d'hyperbolicité. La condition 3 est vérifiée pendant les simulations de balistique intérieure uniquement au début du calcul. Ensuite, à cause de la décomposition de la poudre en gaz au travers de la combustion, on a rapidement $\alpha_1 > \alpha_c$, et comme les vitesses des phases ne sont plus égales, on se retrouve alors dans un cas d'ellipticité.

3.7 Conclusion

Ce chapitre a traité de l'aspect numérique de la simulation des écoulements diphasiques, qui vient compléter le chapitre précédent où nous avons exposé la modélisation des phénomènes d'allumage et de combustion.

Le système de lois de conservation est résolu par une méthode de type volumes finis sur maillage multidimensionnel dont nous avons détaillé le principe. Le point sensible d'une telle méthode est le choix du schéma numérique qui sert à calculer les flux conservatifs et non conservatifs à chaque interface entre les volumes.

L'étude du système d'équations associé au modèle a montré que celui-ci est conditionnellement hyperbolique. Dans les configurations d'ellipticité, les schémas numériques développés dans le cadre des études de systèmes de loi de conservation hyperboliques deviennent instables lorsque le maillage est suffisamment fin, voir simplement inutilisables car ils nécessitent d'utiliser les valeurs propres du système qui deviennent complexes dans les cas non hyperboliques. Notre choix s'est porté sur une adaptation du schéma HLL aux cas non conservatifs pour deux raisons :

1. sa simplicité : seules les vitesses d'onde maximale et minimale ont besoin d'être connues ;
2. sa robustesse : la forte viscosité numérique du schéma le rend particulièrement stable mais induit une grande diffusion numérique.

Dans les cas non hyperboliques, certaines valeurs propres du système ne sont pas réelles, et donc les vitesses d'onde maximale et minimale ne sont pas calculables. Nous proposons dans un premier temps de choisir les vitesses d'onde associées aux équations d'Euler monophasiques. Les résultats sont satisfaisants pour des écoulements monophasiques (hyperboliques), mais pour des écoulements diphasiques, la viscosité numérique ne suffit plus à stabiliser les oscillations numériques lorsque le maillage est trop fin.

Pour contourner le problème d'hyperbolicité, nous proposons une méthode à pas fractionnaires. Le modèle général est décomposé en deux sous-systèmes hyperboliques résolus tour à tour. Bien que le problème général reste conditionnellement hyperbolique, nous pouvons utiliser les valeurs propres de chaque sous-système dans notre schéma numérique. Nous démontrons que sur des maillages grossiers, notre schéma reste stable là où la méthode précédente avait atteint ses limites, parce que la viscosité numérique repousse en maillage l'explosion de la solution. Nous obtenons alors des résultats numériques, mais a priori, lorsque le pas de discrétisation tend vers 0, la solution va irrémédiablement exploser.

Nous confirmons aussi l'effet stabilisateur de la force de traînée qui limite les oscillations numériques en réduisant la vitesse relative entre les phases. L'influence de la contrainte intergranulaire sur le domaine d'hyperbolicité est vérifiée numériquement. En tenant compte de cette pression intergranulaire, les conditions d'hyperbolicité se trouvent modifiées et le système reste hyperbolique pendant un plus long moment au début de la simulation. Des tests numériques sont venus compléter l'étude théorique réalisée précédemment.

Enfin, la méthode consistant à utiliser un maillage en trois dimensions d'espace et y résoudre les équations tridimensionnelles, quelque soit la dimension du problème, est convaincante. La construction de notre maillage est détaillée dans l'annexe A page 181. Nous sommes en mesure de simuler les géométries couramment rencontrées en balistique intérieure sans modifier la forme des équations du modèle. L'ajout de la face verticale de l'allumeur (orthogonale à \vec{x}) permet de tenir compte des effets de la pression totalement négligés dans le cas des équations unidimensionnelles.

Chapitre 4

Modèle de relaxation

Dans les chapitres 1 et 3, nous avons étudié les aspects numériques du modèle de Gough. Ce modèle à une pression est non conservatif et conditionnellement hyperbolique, ce qui a rendu délicate sa résolution numérique par une méthode de volumes finis. L'objectif de ce chapitre est d'appliquer une méthode de relaxation à un modèle d'écoulement gaz-poudre en considérant les vitesses et les pressions différentes pour chaque phase. Nous utiliserons le modèle inconditionnellement hyperbolique mais toujours non conservatif de Baer et Nunziato [BN86] composé de sept équations (équations bilan de masse, quantité de mouvement et d'énergie pour chaque phase et une équation qui décrit l'évolution de la fraction volumique).

En supposant qu'il existe une relation algébrique entre les pressions de chaque phase, comme dans le cas du modèle de Gough où on a posé $p_2 = p_1 + \Lambda(\alpha_2, \rho_2)$, on peut utiliser cette relation pour supprimer l'équation d'évolution de la fraction volumique. Dans ce cas, on se retrouve avec un modèle à six équations dont le domaine d'hyperbolicité est réduit. Une méthode de relaxation de plus en plus utilisée consiste à équilibrer les pressions par un terme source qu'on ajoute à l'équation d'évolution de la fraction volumique. Lorsque l'équilibre est supposé instantané, on retrouve le modèle à six équations tandis que lorsque le délai d'équilibrage est strictement positif, le modèle est hyperbolique.

Nous nous attachons tout particulièrement au cas d'une contrainte granulaire non nulle. Cette contrainte améliore en général le domaine d'hyperbolicité du modèle à six équations [KMB⁺01]. Une attention particulière est portée à l'expression de cette contrainte qui ne peut avoir n'importe quelle forme. Les pressions de chaque phase suivent la loi des gaz raides. De plus, avec certaines hypothèses sur la monotonie de la contrainte intergranulaire, nous sommes en mesure d'établir un principe du maximum sur la fraction de volume de gaz.

Nous proposons une méthode numérique de résolution du système à l'équilibre par une méthode à pas fractionnaires. On résout le système en trois étapes successives. La partie advective du système à sept équations est d'abord résolue. Puis les pressions sont équilibrées grâce à l'équation d'évolution de la fraction volumique. La dernière étape consiste à résoudre le système relaxé avec les termes sources restants. Nous validons notre méthode sur deux cas tests

numériques. Le premier est un cas proposé par Coquel et *al* [CEAG⁺97] qui consiste en un problème de Riemann avec deux gaz parfaits. Le second est une comparaison pour un canon simplifié des résultats numériques à ceux obtenus avec le modèle de Gough.

Hyperbolic relaxation model for granular flow

Alain CARRIÈRE ¹, Thierry GALLOUËT ², Philippe HELLUY ³, Jean-Marc HÉRARD ⁴
et Julien NUSSBAUM ¹

ABSTRACT. In this work, we describe an efficient model for the simulation of a granular gas-powder flow. It is based on the two-velocity two-pressure model of Baer-Nunziato [BN86]. We apply a relaxation technique in order to recover a one-pressure model taking into account the granular stress. We show that the relaxation process is thermodynamically coherent. We then propose a numerical scheme, based on a splitting approach. At the end of each time step, the volume fraction is updated in order to recover the pressure equilibrium. For simplified pressure laws (stiffened gas laws) we are able to prove that the numerical volume fraction satisfies a maximum principle.

Introduction

In this work, we are interested in the numerical modeling of a two-phase (granular-gas) flow with two velocities and two pressures p_1 and p_2 . In one dimension, the model is made up of seven non homogeneous partial differential equations : two mass balance laws, two momentum balance laws, two energy balance laws and one volume fraction evolution. It is similar to the initial model proposed by Baer-Nunziato [BN86]. The main feature of this model is that the left hand side (LHS) of the equation is hyperbolic as shown in several papers. This property is very important because it ensures the mathematical stability of the model.

However, in many industrial applications it is not realistic to admit two independent pressures. Generally, an algebraic relation between the two-pressures is assumed as for example in the Gough model [Gou79] (for a general presentation of two phase flow models, we refer to the book of Gidaspow [Gid94]). It is classically of the form $p_2 = p_1 + R$ where R is the granular

¹ISL, Saint-Louis

²LATP-CMI Marseille

³IRMA-ULP, Strasbourg

⁴EDF, Chatou

stress. In the general case, the granular stress depends on the thermodynamic variables of the two phases.

Using the pressure relation, the volume fraction evolution can be eliminated and a six equations model is obtained. Unfortunately, the new model has a reduced hyperbolic domain. The worst situation is obtained when the granular stress vanishes. In this case, the model is almost never hyperbolic. Thus, several authors have proposed to relax the algebraic relation by giving an adequate source term to the volume fraction evolution that tends to equilibrate the two pressures. This approach is now followed in more and more works : [SA99b], [Hur06], *etc.*. When the equilibration time tends to zero, the six equation model is recovered. When the equilibrium time is > 0 the stability of the model is ensured.

In this paper, we concentrate on the case where the granular stress does not vanish. In this case, it is possible to extend the hyperbolic domain of the six equations model. Generally, it is not possible to remove all the elliptic regions. Therefore, we decide to relax the algebraic relation thanks to an adequate source term in the seven equations model. We show that in some cases this source term is compatible with the second principle of thermodynamics. An important result is that the granular stress R cannot have an arbitrary form.

Then we propose a new numerical method to solve the equilibrium case. For this, we use a splitting algorithm, which consists in :

- evolving the seven equation model without the source term ;
- solving the pressure equilibrium, with accounts for the granular stress ;
- solving the other source terms.

In the second step the pressure equilibrium implies to solve an update for the volume fraction, keeping constant the other variables. Under some monotony hypothesis on the granular stress, and when the pressure laws of the two phases are stiffened gas laws, we are able to prove the existence and uniqueness of the new volume fraction and that it belongs to $[0, 1]$.

Finally, we propose some numerical experiments. In academic cases, we demonstrate some behavior of the relaxed approach in the case of a non-stable (elliptic) case. We then compare the results of our approach with the Gough model [NHH06], for a simplified 1D gun.

4.1 Notations and model

We are interested in a two-phase flow of a granular solid and a gas. The solid is denoted by the index (2) and the gas by the index (1). For more generality, the solid is supposed to be compressible. The unknowns are, for each phase $k = 1, 2$, the partial density ρ_k , the velocity u_k , the internal energy e_k . The volume fractions α_k satisfy $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$. The solid volume fraction α_2 is also called the *porosity*. The pressure of each phase is given by a stiffened gas equation of state

$$p_k = p_k(\rho_k, e_k) = (\gamma_k - 1)\rho_k e_k - \gamma_k \pi_k, \quad (4.1)$$

with $\gamma_k > 1$. We note $\alpha_k \rho_k = m_k$.

The balance of mass, momentum and energy read

$$\begin{aligned}
m_{k,t} + (m_k u_k)_x &= \pm M, \\
(m_k u_k)_t + (m_k u_k^2 + \alpha_k p_k)_x - p_I \alpha_{k,x} &= \pm Q, \\
(m_k E_k)_t + ((m_k E_k + \alpha_k p_k) u_k)_x + p_I \alpha_{k,t} &= \pm S, \\
\alpha_{k,t} + v_I \alpha_{k,x} &= \pm P,
\end{aligned} \tag{4.2}$$

where

$$E_k = e_k + \frac{u_k^2}{2} \tag{4.3}$$

The RHS terms M , Q , P , S are internal exchange source terms that will be detailed later. Here, $\pm = +$ if $k = 1$ and $\pm = -$ if $k = 2$. For the moment, we suppose that there are no external forces and energy sources (this explains the \pm signs in the source terms).

Remark 21: For practical reasons, it is sometimes necessary to write the pressure law for each phase in a modified way. We set

$$e_k = e'_k - e_k^0, \tag{4.4}$$

where e'_k is the translated internal energy of phase k and e_k^0 a reference energy for phase k . We also define the translated total energies

$$E'_k = e_k + e_k^0 + \frac{u_k^2}{2}. \tag{4.5}$$

The energy equation can then be written

$$(m_k E'_k)_t + ((m_k E'_k + \alpha_k p_k) u_k)_x + p_I \alpha_{k,t} = \pm S \mp M e_k^0. \tag{4.6}$$

Now the total translated energy $m_1 E'_1 + m_2 E'_2$ is no more conserved because the \pm terms do not cancel. The term $M(e_2^0 - e_1^0)$ can be identified to a chemical reaction heat.

The quantities p_I and v_I are respectively the interface pressure and the interface velocity. In this paper, we take the special choice of Baer-Nunziato

$$\begin{aligned}
p_I &= p_1, \\
v_I &= u_2.
\end{aligned} \tag{4.7}$$

which enjoys good properties (see [GHS04], [KMB⁺01]) : the LHS of the system 4.2 is hyperbolic (it is proved in the sequel). Moreover, this choice ensures that the non-conservative products are well defined. This is due to the fact that the volume fraction only jumps in linearly degenerated fields. In a linearly degenerated field, the jump relations are simply provided by the Riemann invariants of this field. See [CLS04]. In the applications, the Baer-Nunziato is particularly adapted to granular flows.

4.2 Entropy dissipation

In this section, we establish an entropy dissipation equation. This equation is very important because it permits to select the source terms that are compatible with the second principle of thermodynamics.

For this we first rewrite the system as follows

$$\begin{aligned}
m_k(u_{k,t} + u_k u_{k,x}) + (\alpha_k p_k)_x - p_1 \alpha_{k,x} &= \pm Q \mp u_k M, \\
m_k(e_{k,t} + u_k e_{k,x}) + \frac{u_k}{2} [(m_k u_k)_t + (m_k u_k^2 + \alpha_k p_k)_x + (\alpha_k p_k)_x] \\
+ \frac{1}{2} m_k u_k (u_{k,t} + u_k u_{k,x}) + \alpha_k p_k u_{k,x} + p_1 \alpha_{k,t} &= \pm S \mp e_k M.
\end{aligned} \tag{4.8}$$

The last equation also reads

$$\begin{aligned}
m_k(e_{k,t} + u_k e_{k,x}) + \frac{u_k}{2} [p_1 \alpha_{k,x} \pm Q + (\alpha_k p_k)_x] \\
+ \frac{1}{2} u_k (-\alpha_k p_k)_x + p_1 \alpha_{k,x} \pm Q \mp u_k M + \alpha_k p_k u_{k,x} + p_1 \alpha_{k,t} &= \pm S \mp e_k M.
\end{aligned} \tag{4.9}$$

and

$$m_k(e_{k,t} + u_k e_{k,x}) + \alpha_k p_k u_{k,x} + p_1 (u_k - u_2) \alpha_{k,x} = \pm S \mp e_k M \mp u_k Q \pm \frac{1}{2} u_k^2 M \mp p_1 P \tag{4.10}$$

Finally, we obtain

$$\begin{aligned}
\alpha_{k,t} + u_2 \alpha_{k,x} &= \pm P, \\
\alpha_k (\rho_{k,t} + u_k \rho_{k,x}) + \rho_k (u_k - u_2) \alpha_{k,x} + m_k u_{k,x} &= \pm M \mp \rho_k P, \\
m_k (u_{k,t} + u_k u_{k,x}) + (\alpha_k p_k)_x - p_1 \alpha_{k,x} &= \pm Q \mp u_k M, \\
m_k (e_{k,t} + u_k e_{k,x}) + \alpha_k p_k u_{k,x} + p_1 (u_k - u_2) \alpha_{k,x} &= \pm S \mp e_k M \mp u_k Q \pm \frac{1}{2} u_k^2 M \mp p_1 P
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Now, we introduce entropies s_k one for each phase. The entropies satisfy the following PDE

$$T_k ds_k = de_k - \frac{p_k}{\rho_k^2} d\rho_k + b_k d\alpha_k = T_k \left(\frac{\partial s_k}{\partial e_k} \right) de_k + T_k \left(\frac{\partial s_k}{\partial \rho_k} \right) d\rho_k + T_k \left(\frac{\partial s_k}{\partial \alpha_k} \right) d\alpha_k \tag{4.12}$$

For simplicity, we suppose that there is no granular stress in the gas thus $b_1 = 0$. The chemical potential μ_k is defined by

$$\mu_k = e_k + \frac{p_k}{\rho_k} - T_k s_k \tag{4.13}$$

We multiply the last equation in (4.11) by $1/T_k$, the second by $-p_k/\rho_k/T_k$, the first by $m_k b_k/T_k$ and take the sum

$$\begin{aligned}
m_k (s_{k,t} + u_k s_{k,x}) + \frac{p_1 - p_k}{T_k} (u_k - u_2) \alpha_{k,x} &= \\
\frac{1}{T_k} \left(\pm P (m_k b_k + p_k - p_1) \pm M \left(\frac{u_k^2}{2} - \frac{p_k}{\rho_k} - e_k \right) \pm Q (-u_k) \pm S \right) \\
(m_k s_k)_t + (m_k u_k s_k)_x &= \frac{1}{T_k} \left(\pm P (p_k + m_k b_k - p_1) \pm M \left(T_k s_k + \frac{u_k^2}{2} - \frac{p_k}{\rho_k} - e_k \right) \pm Q (-u_k) \pm S \right)
\end{aligned} \tag{4.14}$$

We add now the two entropy equations and find the entropy dissipation PDE that we sum up in the following proposition

Proposition 3 *Consider a smooth solution of the system (4.2) and two entropy functions s_1 and s_2 satisfying (4.12). Then, this smooth solution satisfies the following entropy dissipation PDE*

$$\begin{aligned} (\sum m_k s_k)_t + (\sum m_k u_k s_k)_x &= \frac{P}{T_2} (p_1 - (p_2 + m_2 b_2)) + \\ M \left(\frac{u_1^2}{2T_1} - \frac{u_2^2}{2T_2} - \frac{\mu_1}{T_1} + \frac{\mu_2}{T_2} \right) + Q \left(\frac{u_2}{T_2} - \frac{u_1}{T_1} \right) + S \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right). \quad (k = 1, 2) \end{aligned} \quad (4.15)$$

Remark 22: According to the second principle of thermodynamics the RHS has to be > 0 . But each term in the formula (4.15) has not a clear physical meaning. It is often more convenient to rewrite the source term in a different way. For exemple, we can set

$$\begin{aligned} Q &= Q_0 + u_1 M, \\ S &= S_0 + u_1 Q_0 + \frac{u_1^2}{2} M + \mu_1 M. \end{aligned} \quad (4.16)$$

In this way, the dissipation rate becomes

$$\frac{M}{T_2} \left(\mu_2 - \mu_1 - \frac{(u_2 - u_1)^2}{2} \right) + \frac{Q_0}{T_2} (u_2 - u_1) + \frac{S_0}{T_1 T_2} (T_2 - T_1). \quad (4.17)$$

It is > 0 if each term in the sum is > 0 . The source S_0 can then be interpreted as the heat flux (it is > 0 when $T_2 > T_1$, i.e. when the phase 2 heats the phase 1). The source Q_0 is the drag force. Finally, M is the mass transfer due to chemical reaction. When $u_1 = u_2$, we recover that the chemical reaction tends to create the phase with the smallest chemical potential.

Remark 23: Generally, the equations (4.12) satisfied by the entropies s_k have not a unique solution. For example, if s_k is a solution, $-s_k$ is also a solution. A supplementary condition has thus to be given in order to fix the sign of the entropy dissipation rate. In the case of conservative systems the entropies are supposed to satisfy some convexity property. For a non-conservative system, it is not possible to apply the Godunov-Mock theorem and it is difficult to extend naturally the convexity approach. We propose here only to forbid the change $s \rightarrow -s$ by imposing that the temperature remains > 0 . It implies

$$\frac{1}{T_k} = \frac{\partial s_k}{\partial e_k} > 0 \quad (4.18)$$

Traditionally, an instantaneous pressure equilibrium is assumed. Formally, it corresponds to the case

$$P = \frac{1}{\varepsilon} (p_1 - (p_2 + m_2 b_2)), \quad \varepsilon \rightarrow 0^+. \quad (4.19)$$

At equilibrium, we thus have

$$\begin{aligned}\alpha_2 &= h \left(\frac{p_2 - p_1}{\rho_2^{\gamma_2}} \right) \\ \Rightarrow d\alpha_2 &= \delta \left(\left(c_2^2 - \gamma_2 \frac{p_2 - p_1}{\rho_2} \right) d\rho_2 + p_{2,s_2} ds_2 - c_1^2 d\rho_1 - p_{1,s_1} ds_1 \right) \\ \text{with } \delta &= \frac{h' \left(\frac{p_2 - p_1}{\rho_2^{\gamma_2}} \right)}{\rho_2^{\gamma_2}} > 0.\end{aligned}\quad (4.27)$$

Example 1 We can consider

$$\theta(\alpha) = \lambda \alpha^{\gamma_2 - 1}. \quad (4.28)$$

We then have

$$\delta = \frac{\alpha_2^{1-1/\gamma_2}}{\lambda \gamma_2 \rho_2^{\gamma_2}}. \quad (4.29)$$

With this choice, the parameter $R_0 = \lambda \rho_2^{\gamma_2}$ has the dimension of a pressure. It represents the maximal pressure corresponding to the maximal compaction $\alpha_2 = 1$. The parameter γ_2 allows to ensure that the granular stress is small when α_2 is small. Indeed, the higher γ_2 is, the faster the granular stress tends to zero when α_2 tends to zero. Usually, the granular stress is supposed to vanish under some critical volume fraction $\alpha_2 < \alpha_c$. This choice is physically intuitive but leads to elliptic regimes. With our choice, the granular stress never vanishes but can be made arbitrarily small for small α_2 . This choice of granular stress will be discussed also in the sequel and in the numerical results.

It is natural to introduce

$$a_2^2 = \frac{\gamma_2 \rho_1}{\gamma_1 \rho_2} c_1^2 + \gamma_2 \frac{\pi_2 - \pi_1}{\rho_2} > 0, \quad (4.30)$$

In such a way that we have also

$$d\alpha_2 = \delta \left(a_2^2 d\rho_2 + p_{2,s_2} ds_2 - c_1^2 d\rho_1 - p_{1,s_1} ds_1 \right) \quad (4.31)$$

It gives another expression of the source term P at equilibrium

$$P = -\delta \left(a_2^2 D_2 \rho_2 + p_{2,s_2} D_2 s_2 - c_1^2 D_2 \rho_1 - p_{1,s_1} D_2 s_1 \right) \quad (4.32)$$

We then rewrite the equilibrium system in the variables

$$Z = (\rho_1, u_1, s_1, \rho_2, u_2, s_2)^T, \quad (4.33)$$

In this variables, the system is

$$Z_t + C(Z)Z_x = 0. \quad (4.34)$$

For the sake of completeness, we give some details of the computations

$$\begin{aligned}\rho_{1,t} + u_1 \rho_{1,x} - \frac{\rho_1}{\alpha_1} (u_1 - u_2) \delta \left(a_2^2 \rho_{2,x} + p_{2,s_2} s_{2,x} - c_1^2 \rho_{1,x} - p_{1,s_1} s_{1,x} \right) + \rho_1 u_{1,x} \\ - \frac{\rho_1}{\alpha_1} \delta \left(a_2^2 D_2 \rho_2 + p_{2,s_2} D_2 s_2 - c_1^2 D_2 \rho_1 - p_{1,s_1} D_2 s_1 \right) &= 0, \\ \rho_{2,t} + u_2 \rho_{2,x} + \frac{\rho_2}{\alpha_2} \delta \left(a_2^2 D_2 \rho_2 + p_{2,s_2} D_2 s_2 - c_1^2 D_2 \rho_1 - p_{1,s_1} D_2 s_1 \right) + \rho_2 u_{2,x} &= 0\end{aligned}\quad (4.35)$$

$$\begin{aligned} \rho_{1,t} + u_1 \rho_{1,x} - \frac{\rho_1}{\alpha_1} u_1 \delta (a_2^2 \rho_{2,x} + p_{2,s_2} s_{2,x} - c_1^2 \rho_{1,x} - p_{1,s_1} s_{1,x}) + \rho_1 u_{1,x} \\ - \frac{\rho_1}{\alpha_1} \delta (a_2^2 \rho_{2,t} + p_{2,s_2} s_{2,t} - c_1^2 \rho_{1,t} - p_{1,s_1} s_{1,t}) = 0, \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned} u_{1,t} + u_1 u_{1,x} + \frac{1}{\rho_1} p_{1,x} = 0, \\ u_{2,t} + u_2 u_{2,x} + \frac{1}{\rho_2} p_{2,x} + \frac{p_2 - p_1}{m_2} \delta (a_2^2 \rho_{2,x} + p_{2,s_2} s_{2,x} - c_1^2 \rho_{1,x} - p_{1,s_1} s_{1,x}) = 0 \end{aligned} \quad (4.37)$$

$$s_{k,t} + u_k s_{k,x} = 0 \quad (4.38)$$

$$\begin{aligned} (1 + \frac{\rho_1 c_1^2 \delta}{\alpha_1}) \rho_{1,t} - \frac{\rho_1 a_2^2 \delta}{\alpha_1} \rho_{2,t} + u_1 \rho_{1,x} \\ + \frac{\rho_1}{\alpha_1} \delta (-a_2^2 u_1 \rho_{2,x} + c_1^2 u_1 \rho_{1,x} + (u_2 - u_1) p_{2,s_2} s_{2,x}) + \rho_1 u_{1,x} = 0 \\ (1 + \frac{\rho_2 a_2^2 \delta}{\alpha_2}) \rho_{2,t} - \frac{\rho_2 c_1^2 \delta}{\alpha_2} \rho_{1,t} + u_2 \rho_{2,x} \\ + \frac{\rho_2}{\alpha_2} \delta (a_2^2 u_2 \rho_{2,x} - c_1^2 u_2 \rho_{1,x} - p_{1,s_1} (u_2 - u_1) s_{1,x}) + \rho_2 u_{2,x} = 0 \end{aligned} \quad (4.39)$$

$$\begin{aligned} (1 + \frac{\rho_1 c_1^2 \delta}{\alpha_1}) \rho_{1,t} - \frac{\rho_1 a_2^2 \delta}{\alpha_1} \rho_{2,t} + (1 + \frac{\rho_1 c_1^2 \delta}{\alpha_1}) u_1 \rho_{1,x} \\ + \frac{\rho_1}{\alpha_1} \delta (-a_2^2 u_1 \rho_{2,x} + p_{2,s_2} (u_2 - u_1) s_{2,x}) + \rho_1 u_{1,x} = 0 \\ (1 + \frac{\rho_2 a_2^2 \delta}{\alpha_2}) \rho_{2,t} - \frac{\rho_2 c_1^2 \delta}{\alpha_2} \rho_{1,t} + (1 + \frac{\rho_2 a_2^2 \delta}{\alpha_2}) u_2 \rho_{2,x} \\ + \frac{\rho_2}{\alpha_2} \delta (-c_1^2 u_2 \rho_{1,x} - p_{1,s_1} (u_2 - u_1) s_{1,x}) + \rho_2 u_{2,x} = 0 \end{aligned} \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} u_{1,t} + u_1 u_{1,x} + \frac{c_1^2}{\rho_1} \rho_{1,x} + \frac{p_{1,s_1}}{\rho_1} s_{1,x} = 0, \\ u_{2,t} + u_2 u_{2,x} + \frac{1}{\rho_2} (c_2^2 + \frac{p_2 - p_1}{\alpha_2} \delta a_2^2) \rho_{2,x} + \frac{p_{2,s_2}}{\rho_2} (1 + \frac{p_2 - p_1}{\alpha_2} \delta) s_{2,x} \\ + \frac{p_2 - p_1}{m_2} \delta (-c_1^2 \rho_{1,x} - p_{1,s_1} s_{1,x}) = 0 \end{aligned} \quad (4.41)$$

Finally, setting

$$\Delta = \alpha_1 \alpha_2 + \delta (\alpha_1 \rho_2 a_2^2 + \alpha_2 \rho_1 c_1^2), \quad (4.42)$$

we find

$$C(Z) = \begin{bmatrix} u_1 + \frac{\rho_1 \rho_2 c_1^2 a_2^2 \delta^2 (u_1 - u_2)}{\Delta} & \frac{\alpha_1 \rho_1 (\alpha_2 + \rho_2 a_2^2 \delta)}{\Delta} & \frac{\rho_1 \rho_2 a_2^2 \delta^2 (u_1 - u_2) p_{1,s_1}}{\Delta} & \frac{\rho_1 a_2^2 \delta (\alpha_2 + \rho_2 a_2^2 \delta) (u_2 - u_1)}{\Delta} & \frac{\alpha_2 \rho_1 \rho_2 a_2^2 \delta}{\Delta} & \frac{\rho_1 \delta (\alpha_2 + \rho_2 a_2^2 \delta) (u_2 - u_1) p_{2,s_2}}{\Delta} \\ \frac{c_1^2}{\rho_1} & u_1 & \frac{p_{1,s_1}}{\rho_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\rho_2 c_1^2 \delta (\alpha_1 + \rho_1 c_1^2 \delta) (u_1 - u_2)}{\Delta} & \frac{\alpha_1 \rho_1 \rho_2 c_1^2 \delta}{\Delta} & \frac{\rho_2 \delta (\alpha_1 + \rho_1 c_1^2 \delta) (u_1 - u_2) p_{1,s_1}}{\Delta} & u_2 + \frac{\rho_1 \rho_2 c_1^2 a_2^2 \delta^2 (u_2 - u_1)}{\delta (p_2 - p_1) + \alpha_2 c_2^2} & \frac{\alpha_2 \rho_2 (\alpha_1 + \rho_1 c_1^2 \delta)}{\Delta} & \frac{\rho_1 \rho_2 c_1^2 \delta^2 (u_2 - u_1) p_{2,s_2}}{(\alpha_2 + \delta (p_2 - p_1)) p_{2,s_2}} \\ \frac{(p_1 - p_2) \delta c_1^2}{\alpha_2 \rho_2} & 0 & \frac{(p_1 - p_2) \delta p_{1,s_1}}{\alpha_2 \rho_2} & 0 & u_2 & \frac{\alpha_2 \rho_2}{u_2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

It is not easy to compute the eigenvalues analytically. It is also difficult to give a practical sufficient condition on all the parameters in order to prove that the eigenvalues are all real. In the case $\delta = 0$, the characteristic polynomial is

$$R(\lambda) = (u_2 - \lambda)(u_1 - \lambda)(u_1 - c_1 - \lambda)(u_1 + c_1 - \lambda)(u_2 - c_2 - \lambda)(u_2 + c_2 - \lambda) \quad (4.43)$$

We recover the same eigenvalues as in (4.23).

With a small λ , which corresponds to a big δ as can be seen by formula (4.29), we observe numerically that the system is elliptic when $u_1 \neq u_2$. When λ increases, δ decreases and we recover an hyperbolic behavior.

Numerical application : we take

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 1.0924 \\ \gamma_2 &= 1.0182 \\ \pi_1 &= \pi_2 = 0 \\ \alpha_1 &= 0.25 \\ p_1 &= 0.2 \times 10^8 \\ \lambda = 0.01 &\Rightarrow p_2 = 0.20000007050881 \times 10^8 \\ u_2 &= -u_1 = 50 \\ \rho_1 &= 76.45430093 \\ \rho_2 &= 836.1239718 \end{aligned} \quad (4.44)$$

The eigenvalues are

$$\begin{aligned} &-310.79 \\ &-50.00 \\ &48.96 - 9.36i \\ &48.96 + 9.36i \\ &50 \\ &212.86 \end{aligned} \quad (4.45)$$

We modify λ to $\lambda = 500$, the pressure p_2 is now $p_2 = 0.20352544 \times 10^8$. The eigenvalues become real

$$\begin{aligned} &-312.54 \\ &-50.000 \\ &30.507 \\ &50.000 \\ &67.438 \\ &214.59 \end{aligned} \quad (4.46)$$

4.4 Relaxation algorithm

In this section, we address now the numerical approximation of system (4.1,4.2). As usual, we use a fractional step method in order to separate the convection step, the pressure equili-

brium step and the source terms step. The convection step is solved by a standard Rusanov scheme already described in many works as [NHHC06]. The standard source terms step is solved by a simple explicit Euler method.

Thus, we concentrate only on the description of the pressure equilibrium step, which can be formally written

$$\begin{aligned}\alpha_{k,t} &= \pm P, \\ m_{k,t} &= u_{k,t} = 0, \\ (m_k e_k)_t + p_1 \alpha_{k,t} &= 0.\end{aligned}\tag{4.47}$$

Because, the equilibrium is supposed to be instantaneous we have actually to update the volume fraction in such a way that we recover the relation $p_2 = p_1 + R$.

We denote by a 0 superscript the physical values in a given cell at the end of the advection step. Because of mass and momentum conservation we have $m_k = m_k^0$ and $u_k = u_k^0$. We have now to compute (α_1, p_1, p_2) in order to pursue the computation. If we assume instantaneous pressure equilibrium, the system is

$$\begin{aligned}p_2 + m_2 b_2 - p_1 &= 0, \\ m_1 e_1 + m_2 e_2 &= m_1^0 e_1^0 + m_2^0 e_2^0, \\ (m_1 e_1 - m_1^0 e_1^0) + p_1 (\alpha_1 - \alpha_1^0) &= 0.\end{aligned}\tag{4.48}$$

We will concentrate on the stiffened gas equation of state with

$$\pi_2 > \pi_1\tag{4.49}$$

and we will state some hypothesis for the granular stress. We suppose that $b_2 = -\rho_2^{\gamma_2-1} \theta(\alpha_2)$ (this simplification is discussed below...) and because of the stiffened gas law, we have

$$m_k e_k = \alpha_k \frac{p_k + \gamma_k \pi_k}{\gamma_k - 1}\tag{4.50}$$

thus we have to solve for (α_1, p_1, p_2) , at each time step and in each cell

$$\begin{aligned}p_2 - \alpha_2 \rho_2^{\gamma_2} \theta(\alpha_2) - p_1 &= 0, \\ \alpha_2 \frac{p_2 + \pi_2}{\gamma_2 - 1} - \alpha_2^0 \frac{p_2^0 + \pi_2}{\gamma_2 - 1} + (p_1 + \pi_2)(\alpha_2 - \alpha_2^0) &= 0, \\ \alpha_1 \frac{p_1 + \pi_1}{\gamma_1 - 1} - \alpha_1^0 \frac{p_1^0 + \pi_1}{\gamma_1 - 1} + (p_1 + \pi_1)(\alpha_1 - \alpha_1^0) &= 0.\end{aligned}\tag{4.51}$$

We have

$$\begin{aligned}p_2 - \alpha_2 \rho_2^{\gamma_2} \theta(\alpha_2) - p_1 &= 0, \\ (\alpha_2 + (\gamma_2 - 1)(\alpha_2 - \alpha_2^0))(p_2 + \pi_2) - \alpha_2^0 (p_2^0 + \pi_2) - (\gamma_2 - 1) \alpha_2 \rho_2^{\gamma_2} \theta(\alpha_2) (\alpha_2 - \alpha_2^0) &= 0, \\ (\alpha_1 + (\gamma_1 - 1)(\alpha_1 - \alpha_1^0))(p_1 + \pi_1) - \alpha_1^0 (p_1^0 + \pi_1) &= 0.\end{aligned}\tag{4.52}$$

We then note

$$\begin{aligned}A_1 &= \alpha_1^0 (p_1^0 + \pi_1), \\ A_2 &= \alpha_2^0 (p_2^0 + \pi_2).\end{aligned}\tag{4.53}$$

For a stiffened gas law, the sound speed c is given by the formula

$$c = \sqrt{\frac{\gamma(p + \pi)}{\rho}}. \quad (4.54)$$

It implies that the two quantities A_1 and A_2 are > 0 . We suppose the following conditions on the granular constraint

$$\begin{aligned} \theta(\alpha) &\geq 0, \\ \theta(\alpha) &= o(\alpha^{\gamma_2-2}) \text{ when } \alpha \rightarrow 0, \\ \theta(\alpha) &\xrightarrow{\alpha \rightarrow 1} \theta_{\max} > 0. \end{aligned} \quad (4.55)$$

We also suppose that the initial volume fraction $0 \leq \alpha_2^0 \leq 1$.

After the elimination of p_1 and p_2 , the system can be rewritten

$$\begin{aligned} G(\alpha_2) &= (\pi_2 - \pi_1)(\alpha_1 + (\gamma_1 - 1)(\alpha_1 - \alpha_1^0))(\alpha_2 + (\gamma_2 - 1)(\alpha_2 - \alpha_2^0)) \\ &+ (\alpha_2^{2-\gamma_2} m_2^{\gamma_2} \theta(\alpha_2) - A_2)(\alpha_1 + (\gamma_1 - 1)(\alpha_1 - \alpha_1^0)) \\ &+ A_1(\alpha_2 + (\gamma_2 - 1)(\alpha_2 - \alpha_2^0)) = 0 \end{aligned} \quad (4.56)$$

We first compute G at the left point

$$\begin{aligned} G(0) &= -(\pi_2 - \pi_1)(\gamma_2 - 1)\alpha_2^0(1 + (\gamma_1 - 1)(1 - \alpha_1^0)) \\ &- A_2(1 + (\gamma_1 - 1)(1 - \alpha_1^0)) \\ &- A_1(\gamma_2 - 1)\alpha_2^0 < 0. \end{aligned} \quad (4.57)$$

For the computation at the right point, we introduce

$$\beta_1 = \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1} \alpha_1^0 \quad (4.58)$$

We have

$$\alpha_1 + (\gamma_1 - 1)(\alpha_1 - \alpha_1^0) > 0 \Leftrightarrow \alpha_1 > \beta_1 \Leftrightarrow \alpha_2 < 1 - \beta_1 \quad (4.59)$$

We compute

$$\begin{aligned} G(1 - \beta_1) &= A_1(1 - \beta_1 + (\gamma_2 - 1)(\alpha_1^0 - \beta_1)) \\ &= \frac{A_1}{\gamma_1 - 1} ((\gamma_1 - 1)(1 - \beta_1) + (\gamma_2 - 1)\beta_1) > 0. \end{aligned} \quad (4.60)$$

Thus we have existence of a solution α_2 to $G(\alpha_2) = 0$ in the interval $[0, 1 - \beta_1]$.

We have to check that this solution leads to correct pressures p_1 and p_2 i.e. that $p_k + \pi_k > 0$. But we have

$$p_1 + \pi_1 = \frac{A_1}{\alpha_1 + (\gamma_1 - 1)(\alpha_1 - \alpha_1^0)} \quad (4.61)$$

This quantity is > 0 if the solution satisfies $\alpha_2 < 1 - \beta_1$. Finally we also have

$$p_2 + \pi_2 = p_1 + \pi_1 + \alpha_2 \rho_2^{\gamma_2} \theta(\alpha_2) + \pi_2 - \pi_1 > 0. \quad (4.62)$$

And the algorithm can continue.

Remark 24: Formula (4.61) shows that we have to discard any solution that is not in the interval $[0, 1 - \beta_1]$. Lets us notice that in many cases, we can find another solution to $G(\alpha_2) = 0$ in $[1 - \beta_1, 1]$.

Now, we will give a sufficient condition on the granular stress in such a way that the solution α_2 is unique in the interval $[0, 1 - \beta_1]$. From now on we set

$$f(\alpha) = \alpha^{2-\gamma_2}\theta(\alpha) \quad (4.63)$$

and we make the hypothesis

$$f \text{ is convex.} \quad (4.64)$$

We have

$$G''(\alpha_2) = -2\gamma_1\gamma_2(\pi_2 - \pi_1) - 2\gamma_1m_2^{\gamma_2}f'(\alpha_2) + (\alpha_1 + (\gamma_1 - 1)(\alpha_1 - \alpha_1^0))m_2^{\gamma_2}f''(\alpha_2) \quad (4.65)$$

The function f is convex, $f(0) = 0$ and f is ≥ 0 . It implies that f is also increasing. Then the two first terms in (4.65) are < 0 and the last is > 0 . On the other hand, it is sufficient that G is concave to prove the uniqueness. But

$$\begin{aligned} G''(\alpha_2) &\leq -2\gamma_1\gamma_2(\pi_2 - \pi_1) - 2\gamma_1m_2^{\gamma_2}f'(\alpha_2) + \\ &\gamma_1m_2^{\gamma_2}(1 - \alpha_2)f''(\alpha_2) \leq 2\gamma_1m_2^{\gamma_2} \left[\frac{1}{2}(1 - \alpha_2)f''(\alpha_2) - f'(\alpha_2) - \frac{\gamma_2}{m_2^{\gamma_2}}(\pi_2 - \pi_1) \right] \end{aligned} \quad (4.66)$$

A sufficient condition is

$$\frac{1}{2}(1 - \alpha_2)f''(\alpha_2) - f'(\alpha_2) - \frac{\gamma_2}{m_2^{\gamma_2}}(\pi_2 - \pi_1) \leq 0 \quad (4.67)$$

Example 2 We take

$$\theta(\alpha) = \lambda\alpha^{\gamma_2-1}, \quad \lambda > 0,$$

we have

$$f(\alpha) = \lambda\alpha, \quad (4.68)$$

wich is indeed convex. The above inequality (4.67) becomes

$$-\lambda - \frac{\gamma_2}{m_2^{\gamma_2}}(\pi_2 - \pi_1) \leq 0 \quad (4.69)$$

and it is obviously satisfied.

Remark 25: The following property is assumed in several works

$$\theta(\alpha) \xrightarrow{\alpha \rightarrow 1} +\infty. \quad (4.70)$$

it is not realistic in our case because the solid phase is supposed to be compressible.

We sum up the previous computations in the following proposition, which is useful for the implementation of the algorithm.

Proposition 5 *Let the granular stress be defined by (4.28). Let*

$$\begin{aligned} 0 &\leq \alpha_1^0 \leq 1, \\ p_k^0 + \pi_k &> 0, \quad k = 1, 2 \end{aligned} \quad (4.71)$$

then the algebraic system (4.51) admits one and only one solution (α_1, p_1, p_2) that satisfies

$$\begin{aligned} 0 &\leq \alpha_1 \leq 1, \\ p_k + \pi_k &> 0, \quad k = 1, 2 \end{aligned} \quad (4.72)$$

In addition we also have

$$\alpha_1 \geq \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1} \alpha_1^0. \quad (4.73)$$

Finally, the solution can be computed by Newton's method by solving equation (4.56) for $\alpha_2 = 1 - \alpha_1$.

A safe choice for the initialisation of the Newton's method is $\alpha_2 = 0$ (because G is concave).

4.5 Remarks on the granular stress

4.5.1 Admissible granular stress

In many papers, the granular stress is supposed to depend only on the solid volume fraction α_2 . This hypothesis is reasonable when the solid phase is incompressible. In this section, we will see that this choice is not compatible with the existence of an entropy satisfying (4.12) in the case of a compressible phase. We then justify the choice that we have made in the previous section to take a granular stress of the form

$$R = m_2 \rho_2^{\gamma_2 - 1} \theta(\alpha_2) = \rho_2^{\gamma_2} g(\alpha_2). \quad (4.74)$$

If we suppose that $b_2 = -\Theta$ depends only of α_2 , it implies $b_2 = 0$. Indeed, omitting the subscripts, we have to solve

$$Tds = de - \frac{p}{\rho^2} d\rho - \Theta d\alpha. \quad (4.75)$$

We note

$$\begin{aligned} \tau &= 1/\rho, \\ T &= 1/\varphi. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Then, $\varphi = \varphi(\tau, e, \alpha)$ is an integrating factor for the form

$$de + pd\tau - \Theta d\alpha, \quad (4.77)$$

which reads

$$ds = \varphi de + \varphi p(\tau, e) d\tau - \varphi \Theta d\alpha. \quad (4.78)$$

The form is closed iff

$$\begin{aligned} \varphi_\alpha &= -\Theta \varphi_e, \\ p\varphi_\alpha &= -\Theta \varphi_\tau, \\ p\varphi_e + p_e \varphi &= \varphi_\tau. \end{aligned} \quad (4.79)$$

If we take $\varphi_\alpha \neq 0$, then it implies $\varphi = 0$, which is impossible. Thus necessarily $\varphi_\alpha = 0$. The only solution is

$$\Theta = 0. \quad (4.80)$$

That is why in this paper, we rather suppose that $\Theta = \Theta(\tau, \alpha)$. We find

$$\begin{aligned} \varphi_\alpha &= -\Theta\varphi_e \\ p\varphi_\alpha &= -\Theta\varphi_\tau - \varphi\Theta_\tau \\ p\varphi_e + p_e\varphi &= \varphi_\tau \end{aligned} \quad (4.81)$$

The general case corresponds to $\varphi_e \neq 0$, $\varphi_\alpha \neq 0$ and $\varphi \neq 0$. We then have necessarily

$$\frac{\Theta_\tau}{\Theta} = p_e. \quad (4.82)$$

In the case of a stiffened gas equation it gives

$$\frac{\Theta_\tau}{\Theta} = \frac{\gamma - 1}{\tau} \Rightarrow \Theta(1/\rho, \alpha) = \theta(\alpha)\rho^{\gamma-1}. \quad (4.83)$$

Of course, it would be also possible to consider the most general case where the granular stress also depends on the internal energy

$$\Theta = \Theta(\alpha, \tau, e). \quad (4.84)$$

However, we have seen that the choice (4.83) is very interesting for the modeling and the numerics because it ensures a maximum principle on the volume fraction during the pressure equilibrium step (4.47).

4.5.2 Associated entropy

It is also possible to compute an entropy associated to the choice (4.83). For this, we postulate the following form of the entropy of the solid phase (as in the previous section, we omit the subscript)

$$s = K(\alpha)F((e - \pi\tau)\tau^{\gamma-1}). \quad (4.85)$$

This choice is justified by the fact that when K is constant, then we recover the general entropy of a stiffened gas. We can verify that our entropy and our stiffened gas EOS are compatible. Without the subscripts, the equation (4.12) reads

$$T ds = de + p d\tau - \Theta d\alpha. \quad (4.86)$$

The temperature is given by

$$s_e = \frac{1}{T} = K(\alpha) \tau^{\gamma-1} f'((e - \pi\tau)\tau^{\gamma-1}) \quad (4.87)$$

In a similar way, we can deduce a relationship between p and T

$$s_\tau = \frac{p}{T} = p s_e. \quad (4.88)$$

This relation permits to compute the pressure

$$\begin{aligned} p &= \frac{s_\tau}{s_e} \\ &= \frac{K(\alpha) ((\gamma - 1) e \tau^{\gamma-2} - \gamma \pi \tau^{\gamma-1}) f'((e - \pi \tau) \tau^{\gamma-1})}{K(\alpha) \tau^{\gamma-1} f'((e - \pi \tau) \tau^{\gamma-1})} \end{aligned} \quad (4.89)$$

and we indeed recover the stiffened gas equation of state

$$p = (\gamma - 1) \frac{e}{\tau} - \gamma \pi. \quad (4.90)$$

We try now to find an expression for the function $F(x)$ in 4.85. From (4.86) we can write

$$s_\alpha = -\frac{\Theta}{T} \quad (4.91)$$

and thus

$$\Theta = -\frac{s_\alpha}{s_e} = -\frac{K'(\alpha) f((e - \pi \tau) \tau^{\gamma-1})}{K(\alpha) f'((e - \pi \tau) \tau^{\gamma-1})} \rho^{\gamma-1} \quad (4.92)$$

But Θ has also to be of the form (4.83). It implies that

$$\begin{aligned} K(\alpha) &= B \exp\left(\int_0^\alpha \theta(u) du\right), \\ F(x) &= A \exp(-Bx). \end{aligned} \quad (4.93)$$

We choose the sign of the constants A and B in such way that the temperature is positive and that the function F is concave. It implies that A and B are > 0 .

4.6 Numerical results

4.6.1 Academical test cases

We consider here two 1D test cases in the elliptic region with or without granular stress. The first case is taken from [CEAG⁺97] (and also studied in [Hur06]). We consider a simple Riemann problem in the interval $[-1/2, 1/2]$. The two phases are supposed to satisfy perfect gases EOS with $\gamma_1 = 1.0924$ and $\gamma_2 = 1.0182$. The initial condition is made of two constant states jumping at $x = 0$. We plot the solution at time $t = 0.0008$. The CFL number is fixed to 0.9. The initial data are

	(L)	(R)	
ρ_1	76.45430093	57.34072568	
u_1	0	0	
p_1	200×10^5	150×10^5	
ρ_2	836.1239718	358.8982226	(4.94)
u_2	0	0	
p_2	200×10^5	150×10^5	
α_1	0.25	0.25	

We perform our algorithm with a granular stress $R = 0$. With a coarse mesh of 50 cells we observe that the solution is smooth. The volume fraction α_1 , the velocities and pressures are plotted on Figures 4.1, 4.2 and 4.3. We perform the same computation for 1000 cells on Figures 4.4, 4.5 and 4.6.

The same computation is made with 10,000 cells. We observe on Figures 4.7, 4.8 and 4.9 that instabilities arise, due to the non-hyperbolic behavior of the model. We have also performed a computation on a 100,000 cells mesh. The oscillations clearly increase as can be seen on Figure 4.10 for the volume fraction.

We perform then another computation on the finer mesh with a granular stress given by (4.28). For the numerics, we have chosen $\lambda = 500$. We observe a (slight) damping of the oscillations on Figures 4.11, 4.12 and 4.13. It seems that the chosen granular stress is not enough to recover an hyperbolic regime. It would be interesting to numerically evaluate the imaginary parts of the eigenvalues to check this point. We have chosen this numerical test case because it is referenced in the literature. Unfortunately, it corresponds to values of γ_k that are very close to one. The choice of γ_2 is important for the behavior of the granular stress (see Example 1). A work is in progress to investigate other values of γ_2 .

4.6.2 Simplified combustion chamber

We consider now a simplified gun. The source term are adapted and simplified from [NHH06]. The mass transfer term is defined by the simplified relations

$$\begin{aligned} M &= \alpha_2 \rho_2 \frac{3\dot{r}}{r} \\ \dot{r} &= 5 \times 10^{-3} m/s \text{ (combustion velocity of the grains)} \\ r &= 10^{-3} m \text{ (radius of the grains)} \end{aligned} \tag{4.95}$$

The momentum source term is given by

$$\begin{aligned} Q &= Mu_2 - D \\ D &= C\alpha_1\alpha_2\rho_2(u_1 - u_2)|u_1 - u_2| \text{ (drag force)} \\ C &= \frac{3}{4r} \text{ (simplified shape factor)} \end{aligned} \tag{4.96}$$

The energy source terms are

$$\begin{aligned} S_1 &= -u_2D + MQ_{ex} \\ S_2 &= u_2D \\ Q_{ex} &= 37.3839 \times 10^6 \text{ J/kg (chemical combustion energy)} \end{aligned} \tag{4.97}$$

They do not cancel but it would be possible to change the model in order to have opposite source terms thanks to a translation of internal energy in the pressure law (see Remark (4.1))

Other parameters of the computations are

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= 1.4 \\
\gamma_2 &= 3 \\
\pi_2 &= 2.1333 \times 10^9 Pa \\
\rho_2 &= 1600 kg/m^3 \text{ (initial solid density)} \\
m_p &= 30 \text{ kg (projectile mass)} \\
p_r &= 10^8 \text{ Pa (resistive pressure)} \\
p_0 &= 10^5 \text{ Pa (initial pressure)} \\
T_0 &= 294 \text{ K (initial temperature)} \\
\rho_0 &= 0.8713 \text{ kg/m}^3 \text{ (initial gas density)} \\
\alpha_{2,0} &= 0.5709 \text{ (initial porosity)} \\
diam &= 132mm \text{ (diameter of the gun)} \\
length &= 762mm \text{ (length of the tube)} \\
mpow &= 9.5255kg \text{ (powder mass)} \\
\lambda &= 0.03 \text{ (granular parameter)} \\
mmol &= 21.3g/mol \text{ (molar mass of the gas)}
\end{aligned} \tag{4.98}$$

We compare our new compressible model with the classical Gough model described for example in [NHHC06].

We obtain the following results for the velocity of the projectile at the exit time

	Gough model	Relax. no granular stress	Relax. with granular stress
velocity (m/s)	425	414	414
exit time (ms)	2.9	3.07	3.07

On Figure 4.14, we compare the pressure evolution at the breech and the shot base of the projectile. We observe a good qualitative agreement between the Gough model and the relaxation model.

Finally, we plot some quantities in the tube at the final time. The porosity, velocities, pressures are given in Figures 4.15, 4.16, 4.17. We also plot on Figure 4.18 the density ρ_2 of the solid phase at the final time in order to check that the variations of the density are small around the initial density $\rho_2 = 1600 \text{ kg/m}^3$.

Conclusion

In this paper, we have adapted the pressure relaxation method described in [SA99b] and [Hur06] to the case of a non-vanishing granular stress.

Starting from the two-velocity, two-pressure multiphase model of Baer-Nunziato, we have proposed a relaxation source term to the void fraction equation that is compatible with the second principle of thermodynamics. In this study, we have shown that

- the source term increases the entropy of the phase mixture ;
- the granular stress cannot have an arbitrary form. It is related to the fact that the differential form satisfied by the entropy is closed.

When the relaxation time tends to zero, we have then proposed a numerical method based on the underlying two-pressure model to approximate the one-pressure model. In the relaxation step, the void fraction is updated in order to equilibrate the jump of pressures with the granular stress. We have proved existence and uniqueness of the equilibrium void fraction under some hypothesis on the granular stress. Those hypothesis are satisfied by physically reasonable models.

Finally, we have proposed some numerical experiments in order to justify practically our approach. In an ideal test case, we verified that when the mesh is refined, the instability of the one-pressure model is (fortunately) not suppressed. We also check that the introduction of the granular stress slightly improves the whole stability. We then performed more realistic simulations. We were able to reproduce correct quantitative features of a simplified gun. We checked that the compressibility of the solid phase remains weak.

The whole approach is thus very promising and has now to be extended to more sophisticated pressure laws, source terms and geometries.

Dans cet article, nous avons adapté la méthode de relaxation des pressions décrite dans [SA99b] et [Hur06] au cas d'une contrainte granulaire non nulle.

À partir du modèle de Baer-Nunziato à deux vitesses et deux pressions, nous avons proposé un terme source de relaxation à l'équation de fraction volumique de gaz, compatible avec le second principe de la thermodynamique. Dans cette étude, nous avons montré que :

- le terme source augmente l'entropie du mélange ;
- la contrainte granulaire ne peut pas avoir une forme arbitraire. Ceci est lié au fait que la forme différentielle satisfaite par l'entropie est fermée.

Quand le temps de relaxation tend vers zéro, nous avons alors proposé une méthode numérique fondée sur le modèle à deux pressions pour approcher le modèle à une pression. Pendant le pas de relaxation, la fraction de volume de gaz est mise à jour afin d'équilibrer le saut de pression avec la contrainte granulaire. Nous avons prouvé l'existence et l'unicité de la fraction de volume de gaz à l'équilibre sous quelques hypothèses concernant la contrainte granulaire. Ces hypothèses sont satisfaites par des modèles physiques cohérents.

Enfin, nous avons proposé des tests numériques pour justifier dans la pratique notre approche. Dans un cas test idéal, nous vérifions que les instabilités du modèle à une pression ne sont pas supprimées quand on raffine le maillage. Nous vérifions également que l'introduction de la contrainte granulaire améliore clairement la stabilité générale. Nous simulons ensuite un cas plus réaliste. Nous sommes capables de reproduire quantitativement des résultats concernant un canon simplifié. Nous avons vérifiés aussi que la compressibilité de la phase solide reste faible.

L'approche globale est ainsi très prometteuse et doit maintenant être étendue à des lois de pression, termes sources et géométrie plus sophistiqués. Elle apporte divers avantages par rapport au modèle de Gough. Nous pouvons supprimer les instabilités en choisissant un temps de relaxation fini. La compressibilité de la phase solide peut être prise en compte. L'étape de relaxation est numériquement soluble quelque soit le cas considéré. Les termes sources peuvent également être choisis pour qu'ils soient compatibles avec la physique du problème.

Les résultats numériques sont très encourageants. Numériquement, nous avons observé que les instabilités du modèle à une pression sur des maillages fins restent présentes dans notre modèle, en notant que l'introduction de la contrainte intergranulaire améliore la stabilité. L'expression de cette contrainte a été développée sous certaines hypothèses physiquement admissibles qui ont permis de démontrer l'existence et l'unicité de la nouvelle fraction volumique après le pas de relaxation, ainsi que son maintien dans l'intervalle $[0; 1]$.

Nous avons également pu reproduire le fonctionnement d'un canon où les termes d'échanges interphasiques ont été simplifiés au maximum. Il y a une bonne concordance entre les résultats numériques obtenus par le modèle de Gough et notre modèle à six équations. En choisissant des paramètres cohérents pour la loi des gaz raides, on peut reproduire l'incompressibilité de la poudre.

Ces travaux nécessitent encore un peu de maturation pour pouvoir simuler des cycles ballistiques réalistes. En particulier, les termes sources doivent être développés afin de reproduire plus fidèlement les interactions entre les phases, et on doit adapter le modèle à d'autres équations d'états.

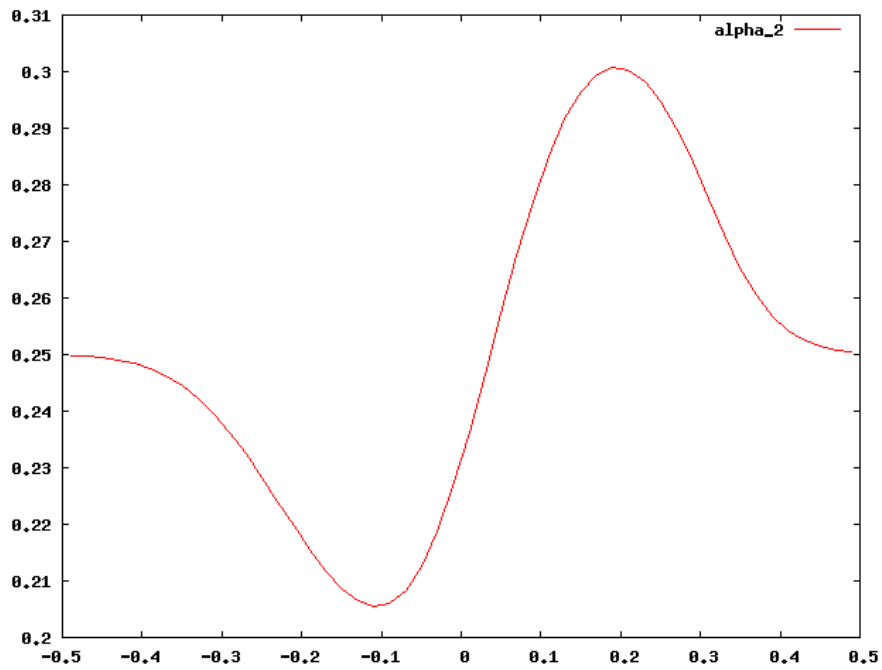
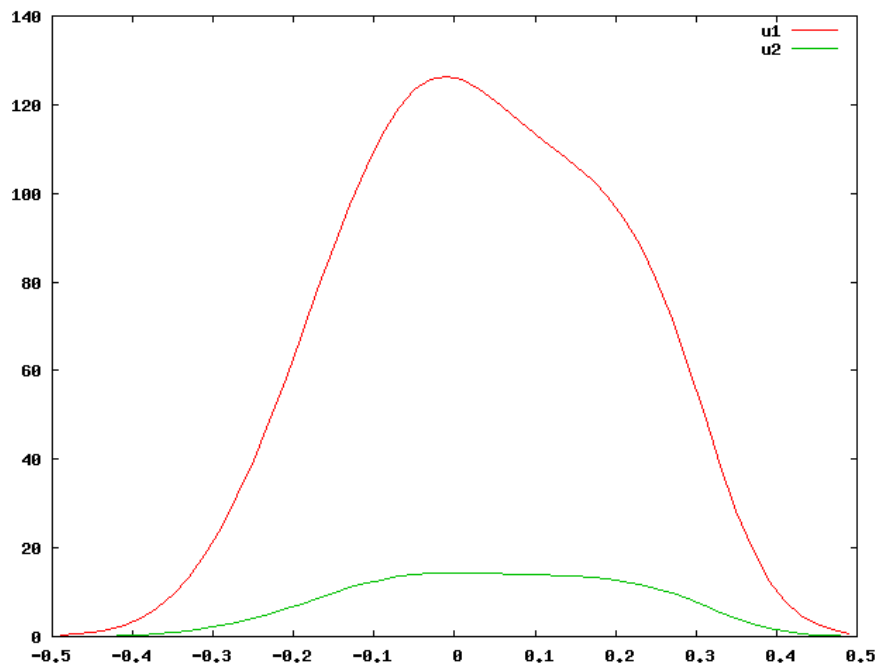


FIG. 4.1 – Void fraction, 50 cells, no granular stress .

FIG. 4.2 – Velocities u_1 and u_2 , 50 cells, no granular stress .

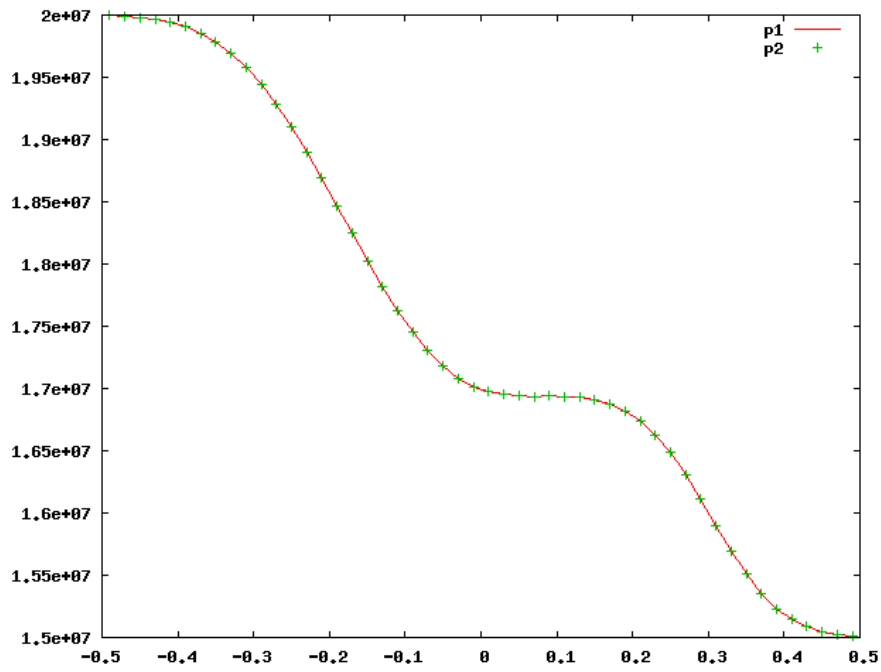


FIG. 4.3 – Pressures, 50 cells, no granular stress .

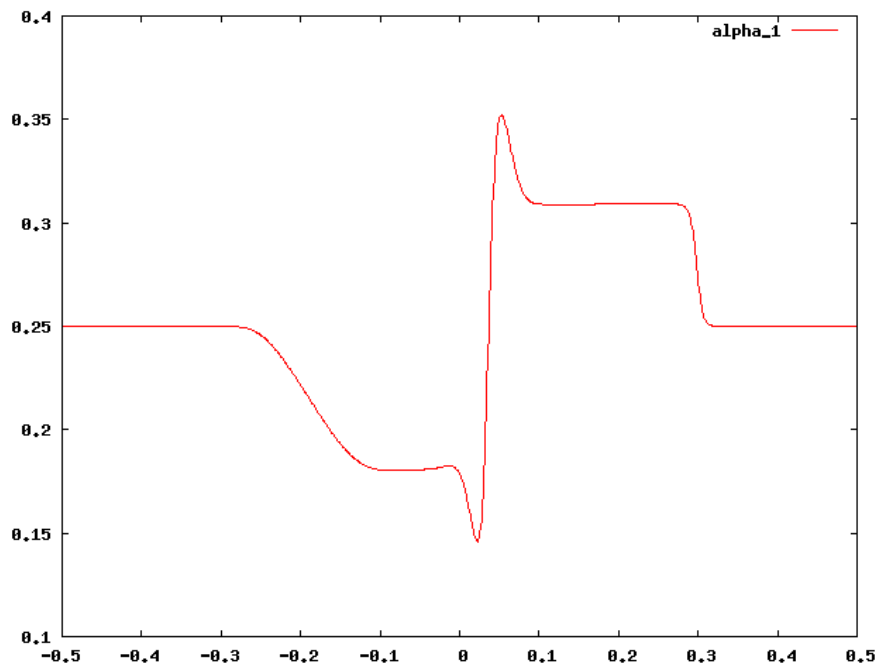


FIG. 4.4 – Void fraction, 1000 cells, no granular stress .

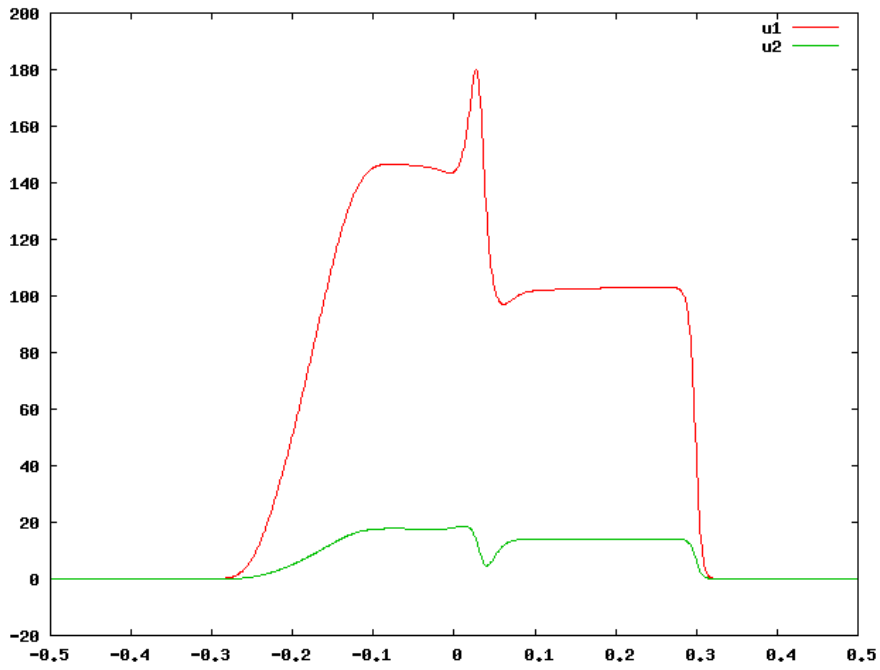
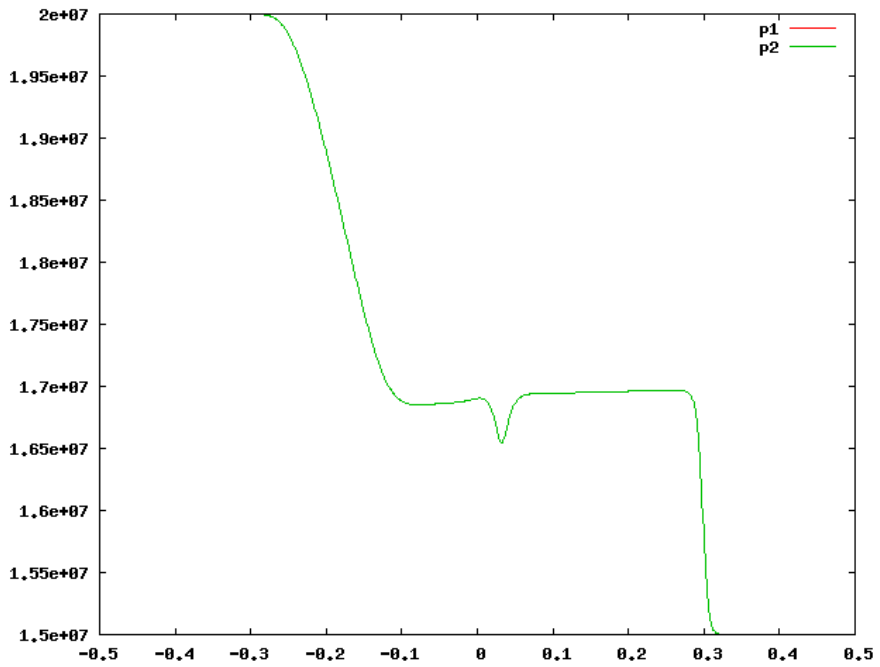
FIG. 4.5 – Velocities u_1 and u_2 , 1000 cells, no granular stress .

FIG. 4.6 – Pressures, 1000 cells, no granular stress .

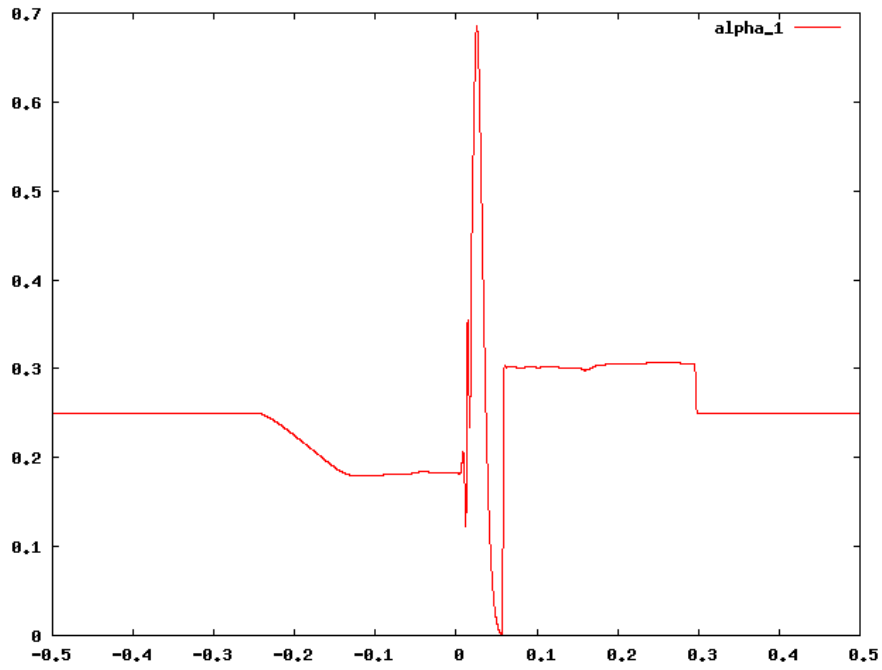
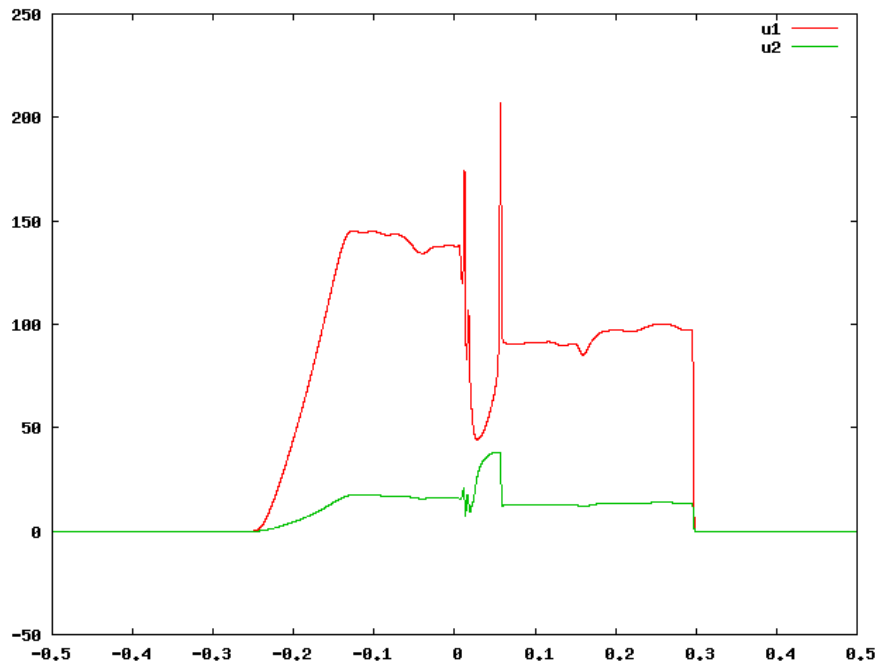


FIG. 4.7 – Void fraction, 10000 cells, no granular stress .

FIG. 4.8 – Velocities u_1 and u_2 , 10000 cells, no granular stress .

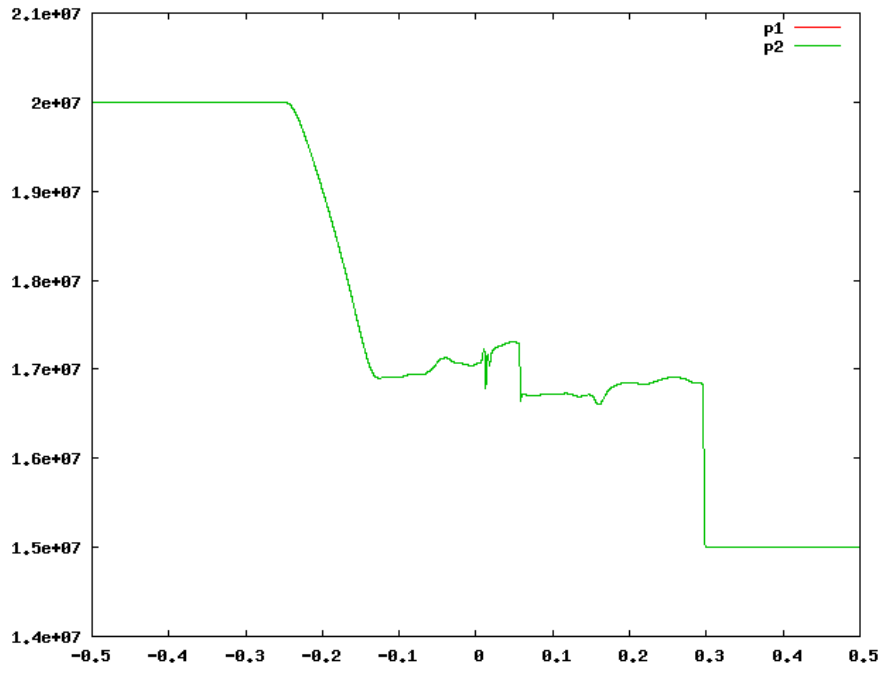


FIG. 4.9 – Pressures, 10000 cells, no granular stress .

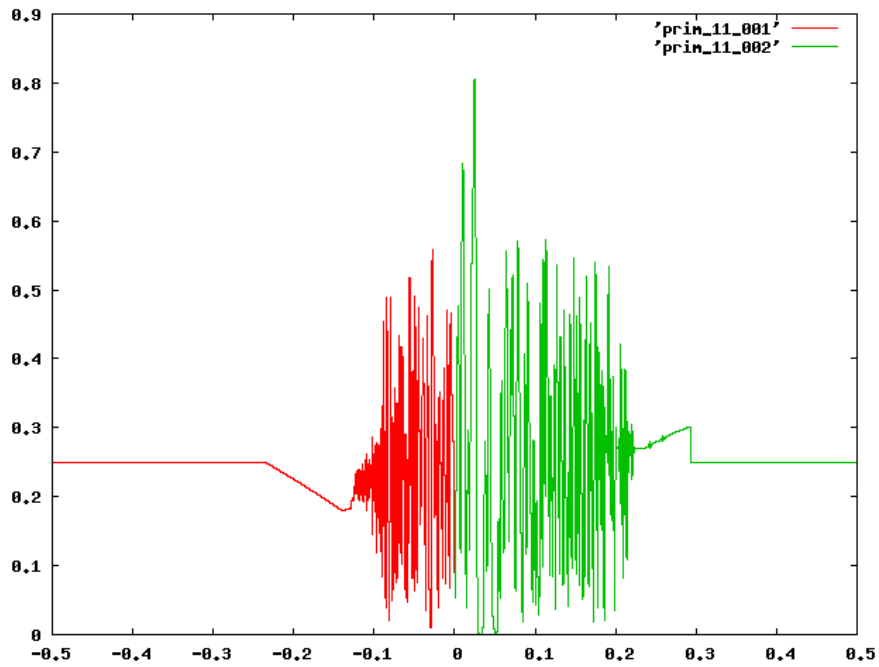


FIG. 4.10 – Void fraction, 100,000 cells, no granular stress .

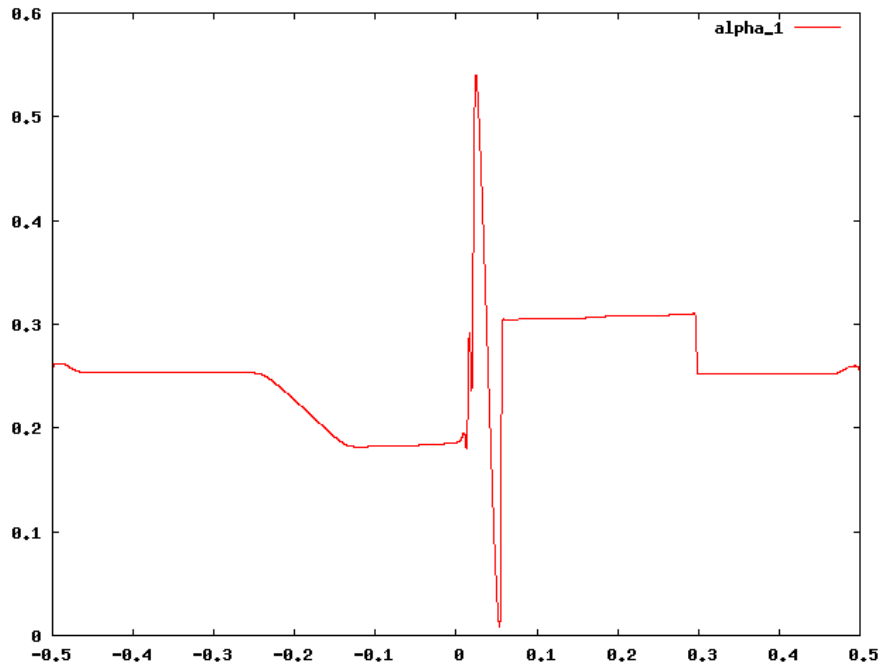
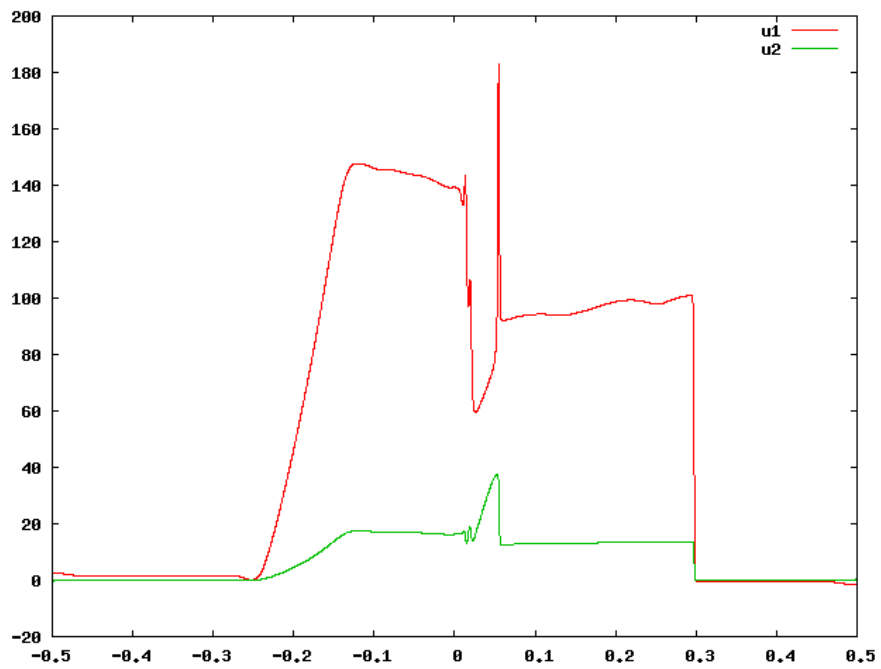


FIG. 4.11 – Void fraction, 10000 cells, with granular stress .

FIG. 4.12 – Velocities u_1 and u_2 , 10000 cells, with granular stress .

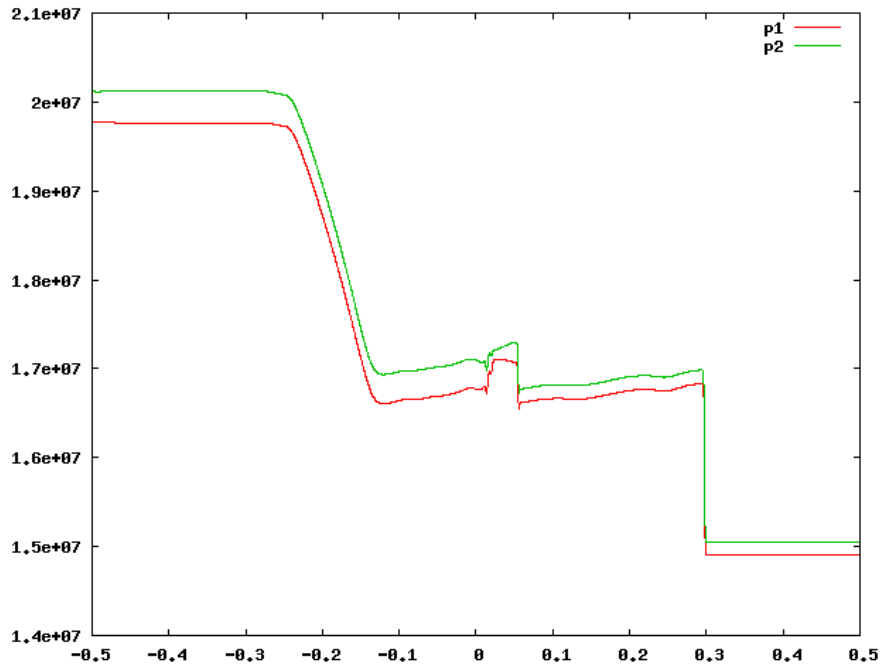


FIG. 4.13 – Pressures, 10000 cells, with granular stress .

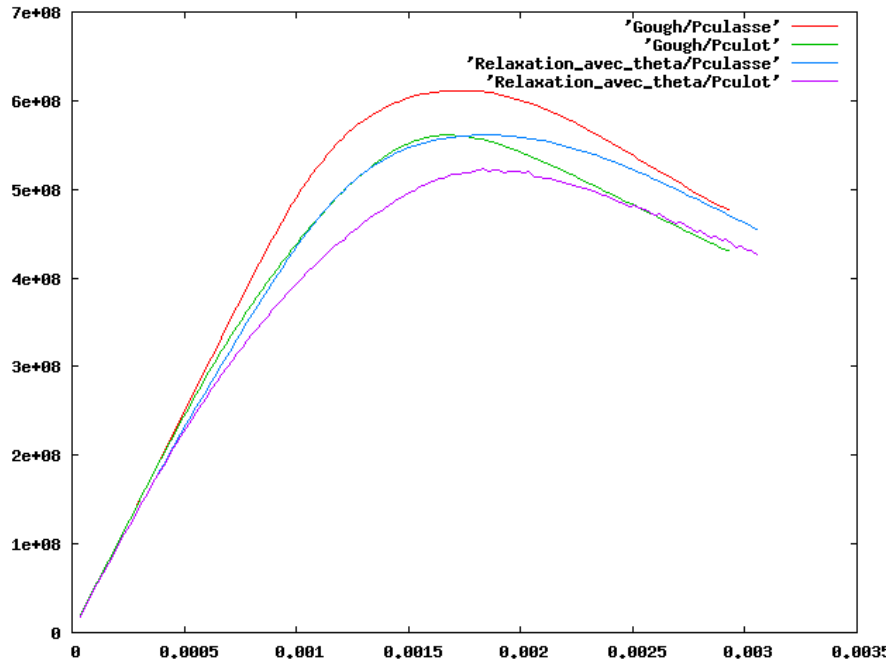


FIG. 4.14 – Pressure evolution at the breech and the shot base during time. Comparison between the Gough and the relaxation model.

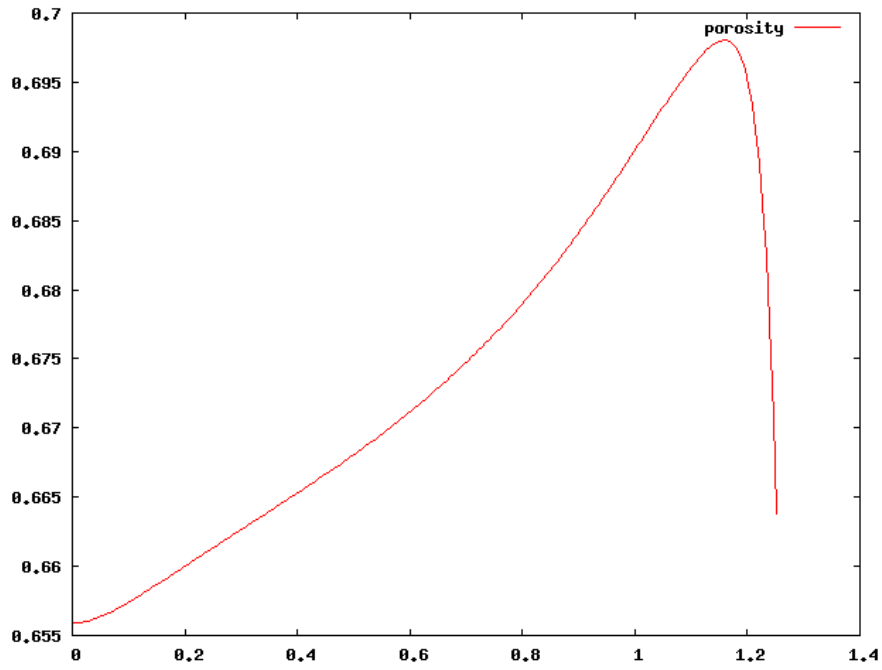


FIG. 4.15 – Porosity at the final time. Relaxation model with granular stress.

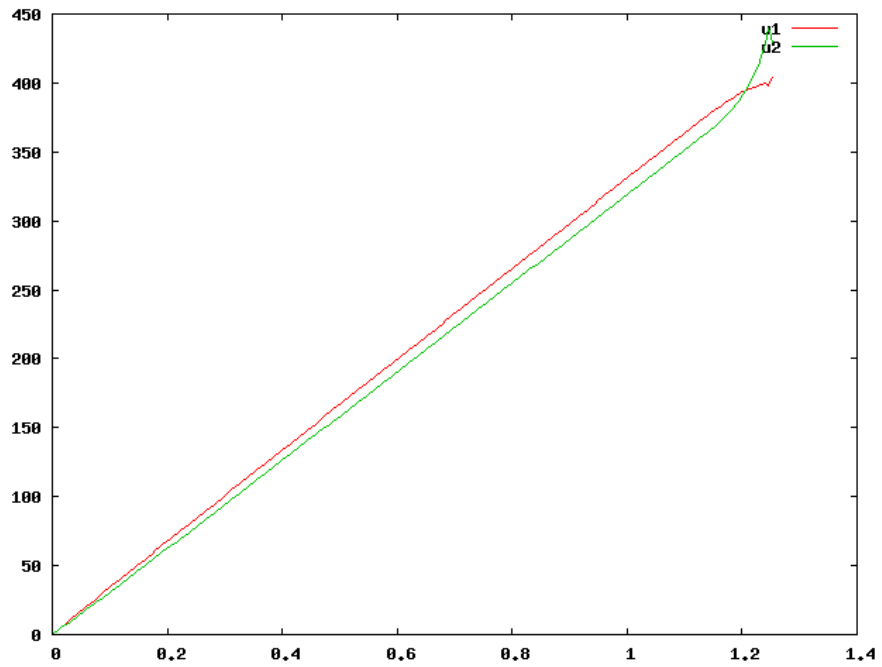


FIG. 4.16 – Velocities at the final time. Relaxation model with granular stress.

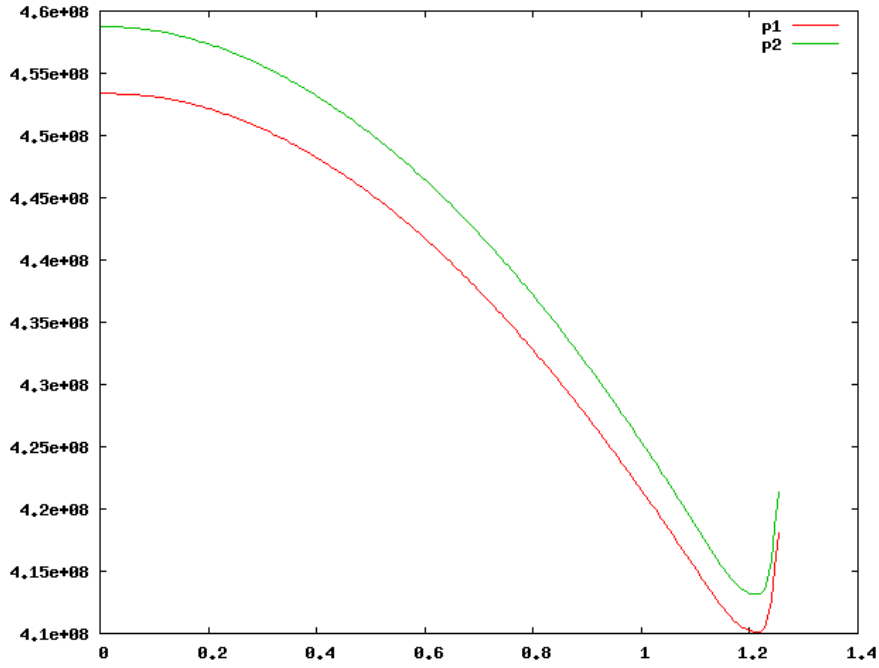


FIG. 4.17 – Pressures at the final time. Relaxation model with granular stress.

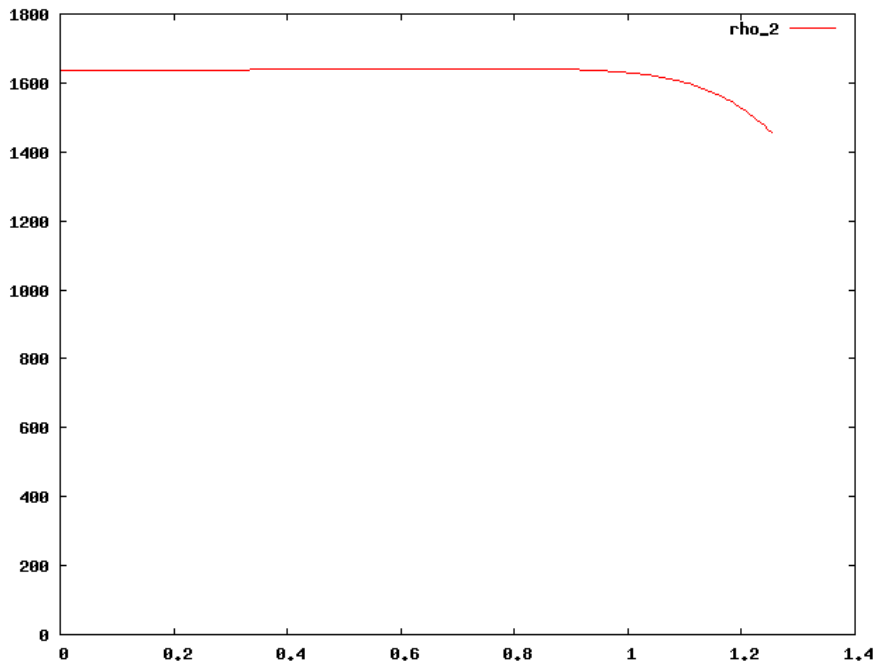


FIG. 4.18 – Density of the solid phase at the final time. Relaxation model with granular stress.

Chapitre 5

Simulations de problèmes de balistique intérieure

Les chapitres précédents ont permis de décrire la modélisation des phénomènes physiques rencontrés dans les problèmes de balistique intérieure ainsi que les méthodes numériques employées pour réaliser les simulations. Les modèles d'allumage et de combustion développés durant cette thèse ont été confrontés à certains résultats expérimentaux. Notre méthode numérique de résolution du système d'équations aux dérivées partielles a également été validée sur des cas tests numériques.

Jusqu'à présent, la validation de notre code s'est faite pas à pas car les phénomènes physiques qu'on cherche à simuler sont complexes et mal maîtrisés. Si les problèmes liés à la méthode numérique se traduisent en général par l'apparition d'oscillations numériques (aucun sens physique), les erreurs liées à une mauvaise modélisation d'un phénomène physique sont très difficiles à interpréter, à cause du grand nombre de relations empiriques et de données physiques et chimiques utilisées.

Dans ce chapitre, nous allons simuler complètement des problèmes de balistique intérieure. Nos résultats seront comparés soit aux résultats d'autres codes de calcul, soit à des mesures expérimentales de tirs effectués au terrain d'expériences ou en laboratoire. Les différences qui peuvent apparaître lors de la comparaison des différents résultats sont délicates à expliquer, car il est difficile de déterminer la source de l'erreur (problème numérique, mauvaises données physiques d'entrée, modélisation trop imparfaite, etc).

Nous proposons de réaliser les simulations pour trois tests différents. Les deux premiers tests portent sur le canon virtuel AGARD 132mm [Rep82] et le canon réel de 40mm. Des simulations de tirs ont déjà été réalisées par différents codes de balistique intérieure et une synthèse des résultats a été présentée aux congrès de balistique respectivement de Vancouver [WCF⁺05] et de Tarragone [WCF⁺07]. Des mesures de tirs réels sont même disponibles pour le canon 40mm. Ces simulations nous permettent d'évaluer les performances de notre code de calcul par rapport aux codes utilisés dans d'autres instituts de recherche. Nous pouvons ainsi faire

varier les paramètres d'entrée du programme et constater leur influence sur la qualité des résultats.

Enfin, nous essayons de reproduire le comportement d'un simulateur d'allumage. Un simulateur d'allumage est composé d'une chambre de combustion similaire à celle rencontrée dans les canons, mais le projectile mobile est remplacé par une membrane immobile qui claque lorsque la pression devient trop importante. Il est possible grâce aux simulateurs de mesurer l'évolution de la pression en de nombreux points dans la chambre, et de tester la géométrie des allumeurs afin d'avoir un gradient de pression minimum dans la chambre. Cette simulation est tridimensionnelle car la géométrie de l'allumeur joue un rôle prépondérant dans les résultats.

Pour toutes les simulations présentées dans ce chapitre, nous utiliserons le modèle de Gough. Nous tenons aussi à préciser que nous ne pouvons pas traiter des maillages fins par manque de puissance de calcul.

Avant de présenter les résultats, il est utile d'apporter quelques précisions sur les problèmes de balistique intérieure.

Pour certaines simulations, nous parlerons d'allumage *parfait*. L'allumage parfait correspond au cas idéal où la poudre est allumée en tout point de la chambre au même instant (souvent fixé comme temps initial). Ce cas est considéré comme idéal car il préserve le système de l'apparition de gradient de pression dans la chambre au début de la combustion. Sous cette hypothèse, la simulation ne tient compte ni du fonctionnement de l'allumeur, ni de l'échauffement du grain, ce qui réduit donc la complexité du calcul.

Dans les études de balistique intérieure, les mesures les plus faciles à effectuer sont la vitesse de sortie du projectile ainsi que l'évolution de la pression des gaz en divers points fixes du canon. Pour les simulations, les données les plus intéressantes sont les pressions maximales atteintes, la vitesse du projectile et l'évolution de la pression à la culasse et au culot (resp. *breech* et *shot base* en anglais) :

- les vitesses du projectile à la bouche du canon peuvent être directement comparées et permettent d'évaluer les performances du canon (la portée du tir est liée à la vitesse initiale du projectile lors de son vol) ;
- les pressions maximales permettent de dimensionner correctement la géométrie du canon. Un canon sous-dimensionné risque d'exploser tandis qu'un canon sur-dimensionné ajoute un encombrement supplémentaire inutile ;
- l'évolution de la pression des gaz en divers points permet d'évaluer la qualité de l'allumage de la charge propulsive. L'absence d'ondes de pression implique des courbes lisses. La figure 5.1 illustre les enregistrements de l'évolution de la pression en un point de la chambre avec trois allumeurs différents : la géométrie est identique mais l'apport de masse et d'énergie de l'allumeur à la chambre sont augmentés (en rouge, le moins violent, en bleu clair le plus violent). La courbe rouge ne présente pas de variation prononcée de sa concavité contrairement aux courbes bleues claire et foncée. L'allumage a donc été plus homogène.

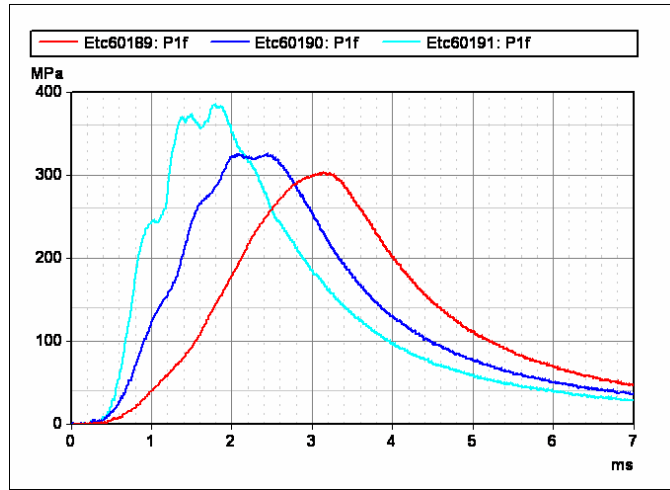


FIG. 5.1 – Mesure de la pression en un même point pour trois allumeurs différents. Évolution au cours du temps.

Une difficulté de la simulation provient de la modélisation du fonctionnement de l’allumeur, qui peut se faire de deux façons différentes : la première, présentée dans le chapitre 1, consiste à ajouter des termes sources aux équations de bilan pour tenir compte de l’ajout de masse de gaz et d’énergie dans la chambre de combustion. Ces termes sources constants sont notés Γ_{ign} , u_{ign} et Q_{ign} dans le premier chapitre. Par cette approche, nous ne modélisons pas correctement la combustion de la poudre noire placée dans l’allumeur ni l’interaction entre les gaz de la chambre et ceux de l’allumeur pour calculer le débit. C’est pourquoi nous avons introduit dans le chapitre 3 la condition aux limites de type entrée subsonique. La densité et la pression des gaz à l’intérieur de l’allumeur sont évaluées en tenant compte de la combustion de la poudre noire, et le débit de gaz au travers des événements est calculé à partir des ondes qui se propagent de part et d’autre de la paroi, qui dépend alors des conditions dans la chambre. L’inconvénient de cette approche est la nécessité de connaître les propriétés physiques et chimiques de la poudre noire, en particulier les coefficients de la loi de Vieille, peu étudiés jusqu’à présent.

L’échauffement de la poudre est simulé par des méthodes proposées dans le chapitre 2. Le critère d’allumage retenu dépend de la quantité d’informations qu’on possède sur la poudre utilisée. En général, la température d’allumage de la poudre est fixée à 444 K. Pour une caractérisation plus fine par le critère des énergies (exposé dans la section 2.2 du chapitre 2), des données sur la cinétique des réactions chimiques de décomposition du solide en gaz sont nécessaires. Les énergies d’activation et facteurs préexponentiel pour les réactions en phase solide ne sont en général pas donnés, et il est très délicat de trouver dans la littérature spécialisée (les livres de Kubota [Kub02], Manelis et *al* [MNRS03], Mader [Mad98] ou Warnatz et *al* [WMD06]) des valeurs cohérentes entre elles. Quant au couplage de la cinétique chimique en phase solide et en phase gazeuse, le manque de données est encore plus important et n’est pas encore applicable même s’il est déjà implémenté dans notre code de calcul.

Lorsque la combustion démarre, la géométrie du grain de poudre est modifiée compte tenu de sa décomposition en gaz. Or, le transfert de masse et d'énergie de la poudre vers le gaz dépend de la surface et du volume instantané (respectivement S_p et V_p) des grains. On rappelle que le taux de transfert de masse s'exprime par

$$\Gamma_c = (1 - \alpha_1) \frac{S_p}{V_p} \rho_2 \dot{r}, \quad (5.1)$$

où \dot{r} représente la vitesse de combustion. L'importance des transferts augmente donc avec la fraction $\frac{S_p}{V_p}$. L'évolution de $\frac{S_p}{S_p^{(0)}}$, $S_p^{(0)}$ étant la surface initiale, en fonction de l'épaisseur brûlée d du grain est donnée par des fonctions appelées *fonctions de forme*, propres à chaque géométrie des grains et notée $\psi(d)$. Les grains peuvent prendre différentes formes :

- sphérique (écrasée ou non) ;
- en bande (parallélépipède rectangle) ;
- monotubulaire : cylindre percé dans le sens de la longueur, pouvant être fendu sur la longueur ;
- multitubulaire : cylindre percé dans le sens de la longueur un certain nombre de fois, typiquement 7, 19 ou 37 trous ;
- hexagonale (perforée ou non) ;
- rosette : agrégat de cylindres perforés ;

On peut classer ces poudres en trois catégories : les poudres à émission dégressive, où $\psi(d)$ diminue avec d (sphère, bande), à émission constante ($\psi(d) \simeq \text{constante}$ pour les poudres monotubulaires) et à phase progressive, où $\psi(d)$ augmente avec d sur une certaine épaisseur (poudres multitubulaires). Suivant les cas, certaines poudres permettent d'avoir des vitesses de sortie du projectile élevées tout en réduisant les pressions maximales. Les différentes fonctions de forme sont répertoriées et détaillées dans [tec85].

Après ce complément d'informations, nous présentons maintenant les résultats des diverses simulations. En coordonnées cylindriques, on pose n_θ et n_r respectivement les nombres de points de discrétisation suivant θ et r . Chaque section de surface $A(x_{1,i})$ (avec $x_{1,i}$ le i^{me} point de discrétisation suivant x) est l'union de toutes les faces $A_{k,l}(x_{1,i})$, avec $1 \leq k \leq n_\theta$ et $1 \leq l \leq n_r$, soit

$$A(x_{1,i}) = \bigcup_{\substack{1 \leq k \leq n_\theta \\ 1 \leq l \leq n_r}} A_{k,l}(x_{1,i}). \quad (5.2)$$

Pour comparer les solutions 1D, 2D et 3D, on procède de la même façon que précédemment en moyennant les solutions sur chaque section, dont la forme discrétisée s'écrit

$$W_{\text{moy}}^n(x_{1,i}, t) = \frac{1}{A(x_{1,i})} \sum_{\substack{1 \leq k \leq n_\theta \\ 1 \leq l \leq n_r}} A_{k,l}(x_{1,i}) W^n(x_{1,i}, x_{2,k}, x_{3,l}, t). \quad (5.3)$$

5.1 Canon virtuel AGARD 132mm

Le cas test du canon AGARD a été utilisé au Royaume-Uni comme test de référence pour le développement de codes de balistique intérieure pendant plusieurs années. La description

de ce cas test a fait l'objet d'un rapport technique [Rep82] dans les années 80. Ce cas test a ensuite servi à comparer les performances de différents codes dans le cadre d'un arrangement technique trinational sur l'étude des phénomènes d'allumage et de combustion. Les résultats de cette comparaison ont été présentés au Symposium International de Balistique [WCF⁺05].

Nous soumettons dans cette section ce cas test à notre programme. Le but est de comparer les résultats à ceux proposés dans [WCF⁺05] et rappelés dans le premier chapitre issu de [NHHC06], en faisant varier plusieurs paramètres. Du point de vue de la physique, nous testons l'allumage parfait ainsi que la simulation du fonctionnement de l'allumeur. Ne disposant pas de données pour la loi d'Arrhénius, le critère d'allumage que nous utiliserons sera le plus classique, à savoir que la combustion débute lorsque la température de surface des grains atteint une température d'allumage T_{ign} donnée, ici $T_{\text{ign}} = 444$ K. L'allumeur est modélisé par deux termes sources de transfert de masse et d'énergie. Du point de vue mathématique, nous vérifions la cohérence des résultats pour des maillages 1D et 2D de différents niveaux de raffinement. La section du canon étant constante, les solutions doivent être relativement proches.

Les données utilisées pour la simulation sont rappelées dans l'annexe D.1 page 206. On utilise une poudre à sept trous. L'allumeur a un rayon de 22 mm et une longueur de 127 mm. On considère deux fonctionnements différents :

1. configuration 1 : correspond à la configuration proposée dans [WCF⁺05]. Le débit est uniforme pour $(x, r) \in [0; 0.127] \times [0; 0.066]$ en 1D et pour $(x, r) \in [0; 0.127] \times [0; 0.022]$ en 2D ;
2. configuration 2 : l'allumeur débite toujours suivant $[0; 0.066]$ en 1D et $[0; 0.022]$ en 2D suivant le rayon, mais possède 5 événements répartis sur sa longueur pour $x = 0$ mm, $x = 31.75$ mm, $x = 63.5$ mm, $x = 95.24$ mm, $x = 127$ mm.

Dans les deux cas, on suppose que l'allumeur n'existe pas physiquement dans la chambre (il n'occupe pas de place dans la géométrie du domaine de calcul, qui est donc à section constante).

La synthèse des résultats de simulations proposées dans [WCF⁺05] montre une grande dispersion des résultats numériques, due à la différence de méthode numérique ainsi qu'aux modèles physiques utilisés. Le tableau 5.1 résume les valeurs extrêmes pour les quatre mesures retenues (pressions culot et culasse maximales, vitesse de bouche du projectile et temps final) suivant la dimension des écoulements considérés.

Résultat numérique	Extremum 1D	Extremum 2D
Pression culot max. (MPa)	324 – 390	328 – 368
Pression culasse max. (MPa)	350 – 423	360 – 396
Vitesse du projectile (m.s ⁻¹)	660 – 722	687 – 711
Temps final (ms)	14.36 – 16.58	15.06 – 16.85

TAB. 5.1 – Résultats de simulations AGARD par d'autres codes de balistique

5.1.1 Allumage parfait

Les premières simulations sont unidimensionnelles sur des maillages de 500, 1000 et 2000 cellules en considérant un allumage parfait, donc en considérant que le lit de poudre est allumé en tout point de la chambre à $t = 0$ s. La pression initiale est fixée à 1 MPa (contre 0.1 MPa dans le cas de l'allumeur simulé) car l'allumeur n'étant pas simulé, la masse de gaz qui ne sera pas ajoutée à la chambre par l'allumeur doit être prise en compte. Dans notre cas, on choisit d'augmenter la pression initiale.

Les résultats du tableau 5.2 sont cohérents avec les valeurs attendues. On observe que les pressions augmentent légèrement lorsqu'on raffine la maillage. Du fait de la forte diffusion du schéma numérique, les pics de pression ont tendance à être lissés, ce qui implique que la vitesse est sous-estimée. Le raffinement du maillage permet de restituer correctement les pics de pressions, et on observe bien que la vitesse de bouche augmente légèrement. Ce phénomène est observable sur la figure 5.2 en comparant les courbes de pression.

Résultat numérique	500 cellules	1000 cellules	2000 cellules
Pression culot max. (MPa)	354	356	359
Pression culasse max. (MPa)	388	391	394
Vitesse du projectile (m.s ⁻¹)	688	695	701
Temps final (ms)	15.47	15.42	15.37

TAB. 5.2 – Allumage parfait pour le cas AGARD sur maillages 1D

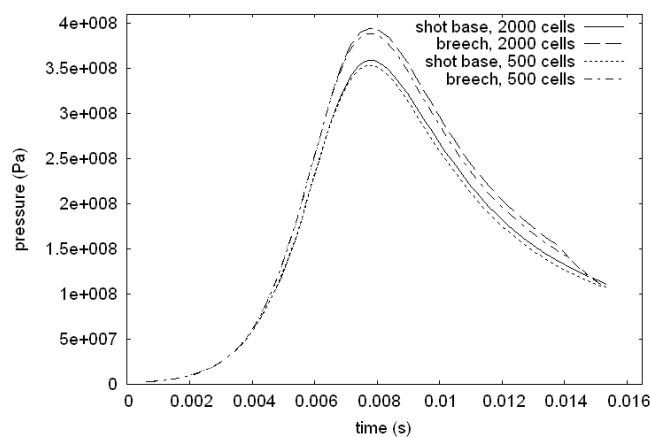


FIG. 5.2 – Évolution de la pression au culot et à la culasse pour 2 maillages 1D différents. Allumage parfait.

Dans le cas 2D, toujours en allumage parfait, les résultats numériques du tableau 5.3 montrent que le passage du maillage 1D au maillage 2D modifie légèrement les résultats en évaluant des

pressions maximales plus élevées (figure 5.3), à la borne supérieure des valeurs calculées par les autres codes de balistique. La vitesse et le temps de simulation restent corrects. Comme la section du canon reste constante, le raffinement supplémentaire du maillage suivant le rayon n'a pas d'effet visible sur les résultats.

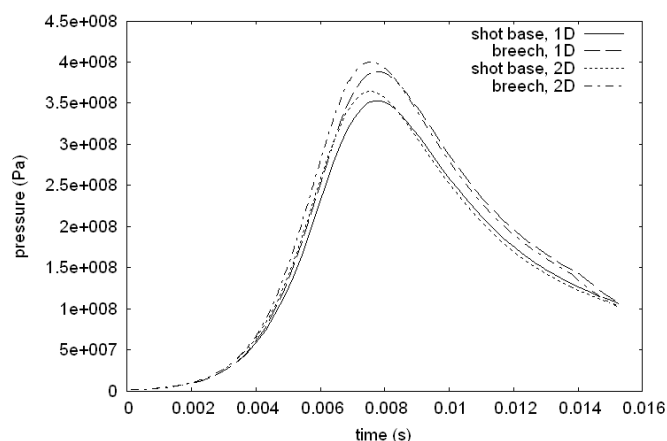


FIG. 5.3 – Évolution de la pression au culot et à la culasse pour des maillages de dimension 500×1 et 500×10 . Allumage parfait.

5.1.2 Simulation de l'allumeur

On simule maintenant un cas plus réaliste où la poudre propulsive est allumée par transfert thermique entre la surface des grains et les gaz chauds issus de l'allumeur. On teste les deux configurations de l'allumeur. Dans les deux cas, le fonctionnement de l'allumeur est simulé pendant 10 ms par des termes sources ($\Gamma_{\text{ign}} = 13132 \text{ kg/m}^3 \cdot \text{s}$ et $Q_{\text{ign}} = 1.5702 \cdot 10^6 \text{ J/kg}$).

Configuration 1

Dans le cas de la configuration 1, on distingue deux fonctionnements différents suivant la dimension du maillage, comme proposé dans [WCF⁺05] :

- en dimension 1, l'allumeur débite sur tout le rayon. Les termes sources sont donc appliqués aux cellules qui vérifient $(x, r) \in [0; 0.127] \times [0; 0.066]$;
- en dimension 2, l'allumeur débite seulement sur une partie du rayon, autour de l'axe de révolution de la chambre de combustion. Les termes sources sont donc appliqués aux cellules qui vérifient $(x, r) \in [0; 0.127] \times [0; 0.022]$.

La configuration 2 se différencie de la configuration 2 car elle considère que l'allumeur ne débite qu'en cinq points suivant l'axe de révolution. Les tableaux 5.4 et 5.5 résument les résultats des simulations 1D et 2D.

On constate que les pressions se situent vers les valeurs maximales calculées par les autres codes, quelle que soit la dimension du maillage, mais restent acceptables. Les résultats numériques sont donc cohérents.

En étudiant les courbes d'évolution de la pression au culot et à la culasse (la figure 5.4 correspond à une simulation sur un maillage de 2000 cellules), on reproduit un phénomène expliqué précédemment : contrairement à l'allumage parfait, le fonctionnement de l'allumeur induit une inflammation progressive de la charge propulsive. La libération de gaz par la combustion des grains, à laquelle est ajoutée la production de gaz issue de l'allumeur, entraîne l'apparition d'ondes de pression. Les courbes lisses présentées pour le cas de l'allumage parfait sont remplacées par des courbes où la pression au culot peut devenir supérieure à la pression à la culasse. Cela est facilement observable en traçant la différence des deux pressions (figure 5.5). Il est surtout intéressant d'étudier ce graphique entre $t = 0$ ms et $t = 7$ ms, car ensuite les ondes de pression qui viennent se réfléchir au culot sont amorties par le mouvement du projectile. Il est à noter que comme pour le cas de l'allumage parfait, un raffinement de

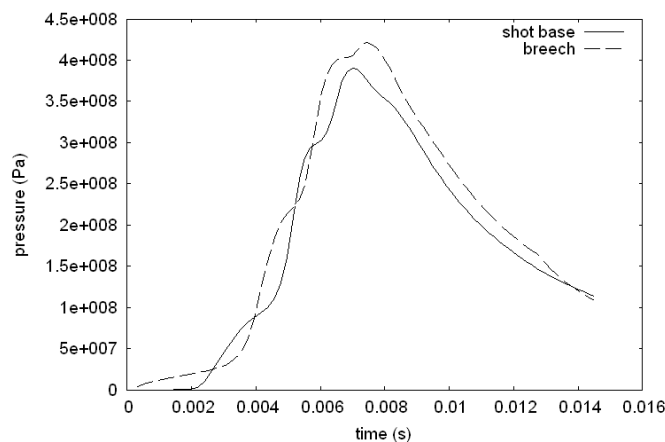


FIG. 5.4 – Évolution de la pression au culot et à la culasse dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 1. Maillage 1D de 2000 mailles.

maillage insuffisant a tendance à lisser les pressions, ce qui explique que les oscillations de la figure 5.5 sont de plus grande amplitude pour les maillages fins.

Pour les simulations en une dimension d'espace, l'allumeur débite dans un volume défini par $(x, r) \in [0; 0.127] \times [0; 0.066]$, c'est-à-dire couvrant tout le rayon de la chambre. En deux dimensions d'espace, le cas test proposé dans [WCF⁺05] modifie les dimensions de l'allumeur. L'allumeur débite dans un espace plus restreint, à savoir dans le volume décrit par le cylindre $(x, r) \in [0; 0.127] \times [0; 0.022]$. Ce cas est plus réaliste car l'allumeur débite dans un volume proche de l'axe de révolution.

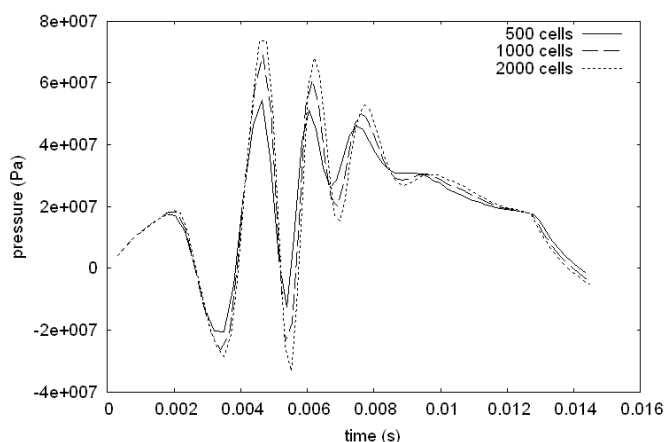


FIG. 5.5 – Évolution de la différence de pression entre la culasse et le culot dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 1. Simulations 1D.

Le débit par unité de volume Γ_{ign} étant le même pour les deux cas, l'apport de masse et d'énergie dans la chambre de combustion est plus faible en dimension 2 qu'en dimension 1. Nous observons donc logiquement un retard dans l'évolution des pressions pour des maillages de dimension 2 par rapport au cas monodimensionnel. L'échauffement du lit de poudre est donc plus diffus. De plus, l'écoulement est moins perturbé par le fonctionnement de l'allumeur. On obtient alors des courbes de pression beaucoup plus lisses, comme le montrent les courbes d'évolution de la pression au culot (figure 5.6) et à la culasse (figure 5.7). Sur la figure 5.8, on observe que les oscillations de pression de part et d'autre de la chambre sont moins fortes.

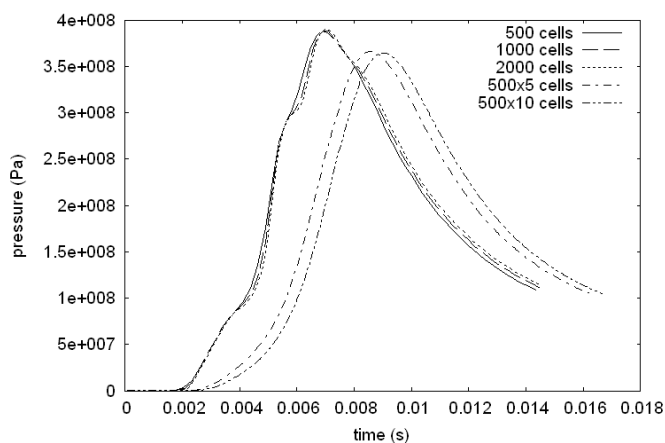


FIG. 5.6 – Évolution de la pression au culot dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 1. Comparaison des simulations 1D et 2D.

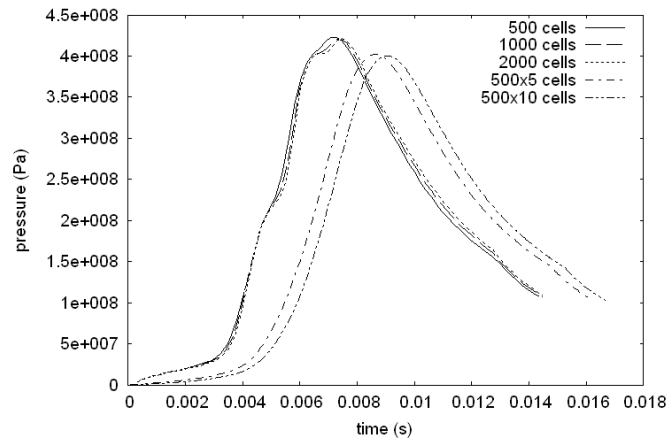


FIG. 5.7 – Évolution de la pression à la culasse dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 1. Comparaison des simulations 1D et 2D.

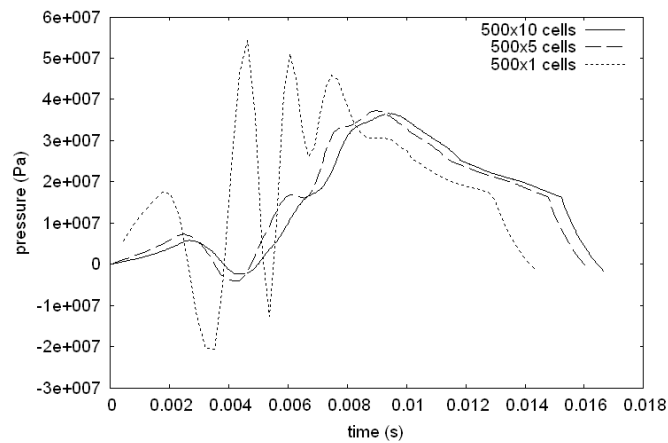


FIG. 5.8 – Évolution de la différence de pression entre la culasse et le culot dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 1. Simulations 2D.

Configuration 2

La deuxième configuration est plus réaliste. L'allumeur débite ponctuellement en cinq points répartis uniformément sur sa longueur $x = 0$ mm, $x = 31.75$ mm, $x = 63.5$ mm, $x = 95.24$ mm, $x = 127$ mm. Les résultats des simulations 1D sont résumés dans le tableau 5.6. Ils correspondent aux résultats attendus, excepté pour le temps final, qui augmente avec le raffinement du maillage. Cela est dû à la construction du maillage. Les termes sources correspondant à l'allumeur sont activés pour les cellules voisines des points où se trouvent les événements. Plus le maillage est fin, plus le volume des cellules est petit, et plus l'apport en masse et en énergie de l'allumeur par rapport au volume total est faible. Une correction de Γ_{ign} est à apporter pour obtenir une simulation de l'allumeur indépendante du maillage. Au niveau des oscillations de pression, cette configuration d'allumeur est plus adaptée car les profils de pressions sont plus lisses. Pour un maillage de 2000 cellules correspondant à la figure 5.4, on observe que le gradient de pression entre les deux extrémités de la chambre au cours de l'allumage reste très faible comparé à la configuration précédente. L'amplitude de cette différence est divisée par deux (10 MPa contre 20 MPa pour la configuration 1) et il n'y a qu'une seule réflexion de l'onde de pression telle que $P_{\text{culot}} > P_{\text{culasse}}$ (figure 5.10).

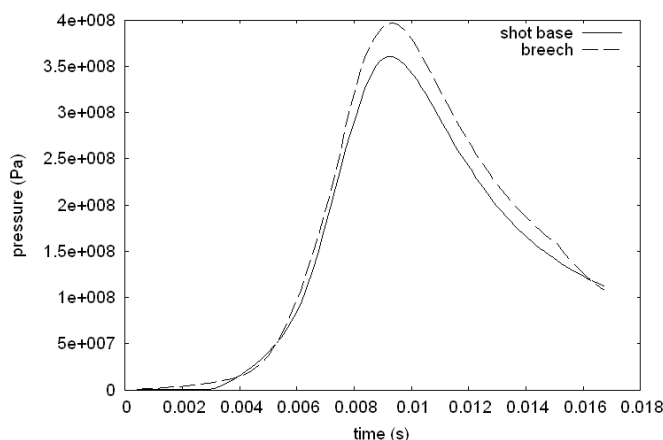


FIG. 5.9 – Évolution de la pression au culot et à la culasse dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 2. Maillage 1D de 2000 mailles.

Les simulations 2D confirment la nécessité de corriger la valeur de Γ_{ign} : les résultats du tableau 5.7 sont cohérents entre eux, excepté pour le temps de simulation qui est beaucoup plus élevé pour le maillage le plus fin. Les maxima de pression sont légèrement plus élevés, la vitesse du projectile est équivalente, mais comme l'apport d'énergie de l'allumeur est plus lent, la charge met plus de temps à s'allumer, et les pressions augmentent avec du retard. Pour se rendre compte du décalage en temps, on trace l'évolution des pressions au culot et à la culasse respectivement dans les figures 5.11 et 5.12. De même que dans le cas précédent, l'allumeur étant moins puissant, les oscillations de pression sont presque complètement atténuées, légèrement visibles sur la figure 5.13.

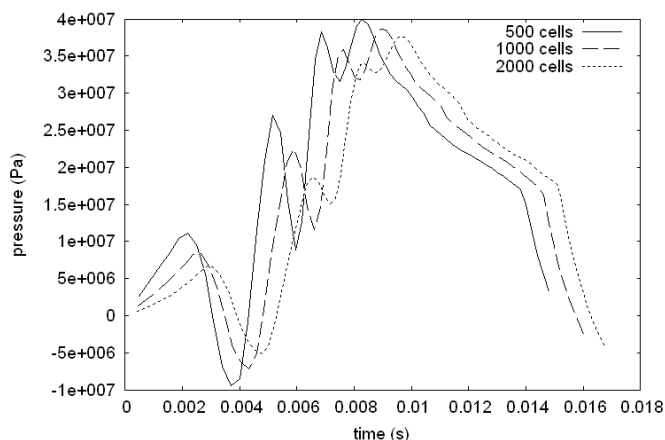


FIG. 5.10 – Évolution de la différence de pression entre la culasse et le culot dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 2. Simulations 1D.

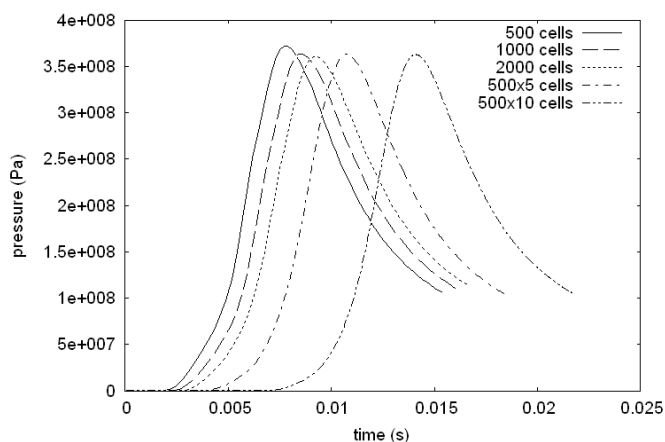


FIG. 5.11 – Évolution de la pression au culot dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 2. Comparaison des simulations 1D et 2D.

Remarque sur le front de flamme

Lors de la simulation d'un allumage réel, l'inflammation du lit de poudre n'est pas homogène. On peut observer l'évolution du front de flamme à l'intérieur de la chambre de combustion pour un allumeur dans la configuration 1 sur la figure 5.14. La propagation de l'allumage de la poudre peut se faire de plusieurs manières : transfert de chaleur conductif (entre les grains), convectif (par les gaz chauds) ou radiatif (émis par les grains allumés). Dans le chapitre 2, nous avons choisi de modéliser le flux de chaleur ϕ_e qui atteint la surface d'un

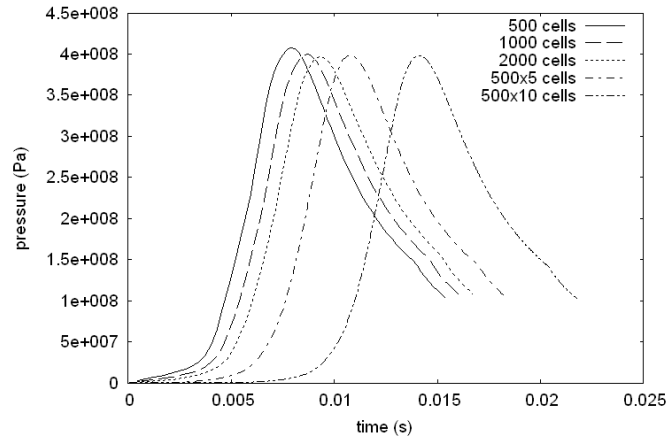


FIG. 5.12 – Évolution de la pression à la culasse dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 2. Comparaison des simulations 1D et 2D.

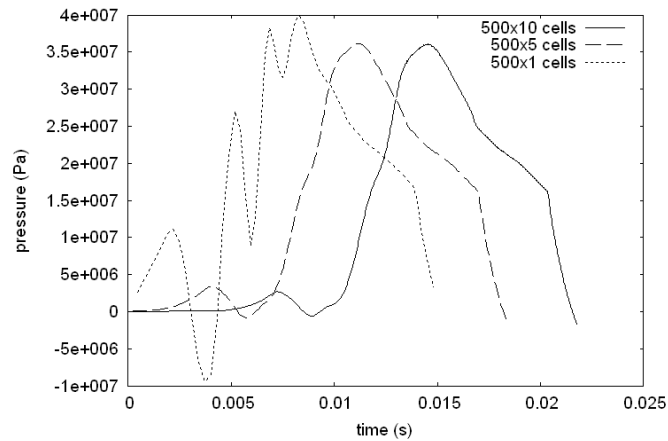


FIG. 5.13 – Évolution de la différence de pression entre la culasse et le culot dans le cas d'un allumeur fonctionnant dans la configuration 2. Simulations 2D.

grain par l'expression

$$\phi_e(t) = h_t(t) (T_g(t) - T_s(t)) , \quad (5.4)$$

où on rappelle que T_g et T_s sont respectivement la température du gaz et de la surface du grain. Le terme h_t est le coefficient de transfert thermique. Dans notre modélisation, nous avons supposé que la convection est le principal mécanisme de transfert thermique dans les problèmes de balistique intérieure, les autres pouvant être négligés. Ce coefficient évolue dans le même sens que la vitesse relative entre le gaz et le grain. Le front de flamme est donc d'une certaine manière convecté par le gaz. On peut vérifier cette remarque en traçant sur la figure 5.15 le vecteur vitesse du gaz correspondant à la même simulation que la figure 5.14.

Résultat numérique	500 × 1	500 × 5	500 × 10
Pression culot max. (MPa)	354	364	364
Pression culasse max. (MPa)	388	400	400
Vitesse du projectile (m.s ⁻¹)	688	693	693
Temps final (ms)	15.47	15.23	15.23

TAB. 5.3 – Allumage parfait pour le cas AGARD sur maillages 2D

Résultat numérique	500 cellules	1000 cellules	2000 cellules
Pression culot max. (MPa)	388	389	391
Pression culasse max. (MPa)	423	421	421
Vitesse du projectile (m.s ⁻¹)	707	712	716
Temps final (ms)	14.56	14.58	14.60

TAB. 5.4 – Allumage simulé pour le cas AGARD sur maillages 1D. L'allumeur fonctionne dans la configuration 1.

Résultat numérique	500 × 5 cellules	500 × 10 cellules
Pression culot max. (MPa)	366	365
Pression culasse max. (MPa)	402	400
Vitesse du projectile (m.s ⁻¹)	695	694
Temps final (ms)	16.25	16.69

TAB. 5.5 – Allumage simulé pour le cas AGARD sur maillages 2D. L'allumeur fonctionne dans la configuration 1.

Résultat numérique	500 cellules	1000 cellules	2000 cellules
Pression culot max. (MPa)	372	364	362
Pression culasse max. (MPa)	408	400	397
Vitesse du projectile (m.s ⁻¹)	698	699	703
Temps final (ms)	15.46	16.19	16.83

TAB. 5.6 – Allumage simulé pour le cas AGARD sur maillages 1D. L'allumeur débite en 5 points.

Résultat numérique	500 × 1 cellules	500 × 5 cellules	500 × 10 cellules
Pression culot max. (MPa)	354	356	362
Pression culasse max. (MPa)	388	391	398
Vitesse du projectile (m.s ⁻¹)	688	695	693
Temps final (ms)	15.47	15.42	21.78

TAB. 5.7 – Allumage simulé pour le cas AGARD sur différents maillages 2D. L'allumeur débite en 5 points.

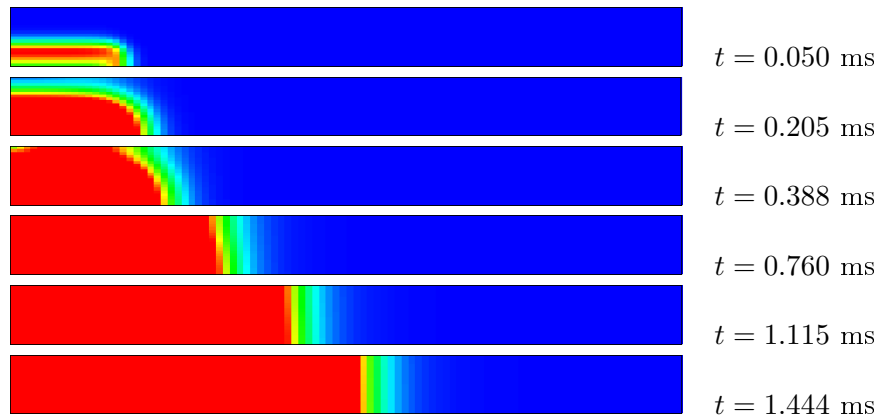


FIG. 5.14 – Évolution du front de flamme dans le lit de poudre. Tracé de la température de surface des grains au cours du temps. Le domaine de calcul correspond à la chambre de combustion avec un maillage de 100×20 .

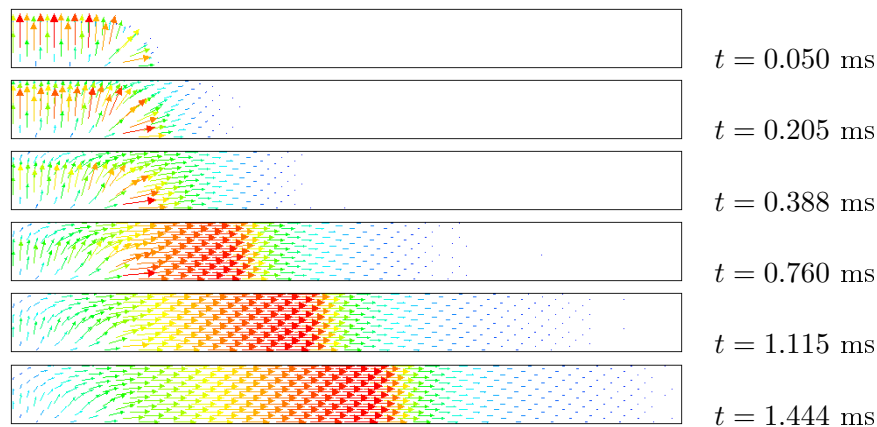


FIG. 5.15 – Déplacement du gaz dans le lit de poudre. Tracé du vecteur vitesse. Le domaine de calcul correspond à la chambre de combustion avec un maillage de 100×20 .

5.2 Canon réel 40mm

Nous étudions maintenant le canon réel de calibre 40mm, dont les données ont été mises à disposition de la communauté scientifique et sont réunies dans l'annexe D.2 page 207. Ce canon présente une variation de section dans la chambre de combustion : le diamètre à la culasse est de 42 mm tandis que le calibre du tube est de 40 mm. La pente s'amorce à $x = 384$ mm pour atteindre la section 40 mm de diamètre à $x = 434$ mm. L'allumeur est un cylindre de longueur 50 mm et de rayon 2.5 mm. Il est perforé de deux événements qui se situent à $x = 10$ mm et $x = 35$ mm. On utilise une poudre tubulaire fendue dont la fonction de forme est disponible dans [tec85]. Sa composition chimique n'est pas connue, excepté le fait que ce soit une poudre

"triple base", ce qui signifie qu'elle est principalement constituée de trois espèces chimiques. Nous devons à nouveau nous contenter du critère d'allumage le plus simple, avec une température d'allumage $T_{\text{ign}} = 444 \text{ K}$.

Des séries de tirs ont été réalisées, dont les résultats ont pu être reproduits. Des mesures de pression et de vitesse de projectile ont donc pu être établies : avec un projectile de 790 g et une masse de poudre propulsive de 440 g, on atteint une vitesse de 1234 m.s^{-1} pour une pression maximale de 428 MPa à la culasse. Comme le canon AGARD 132mm, ce cas test a été soumis à divers codes de balistique intérieure. La comparaison des résultats est présentée dans [WCF⁺07]. On remarque que dans beaucoup de cas, les données physiques de la poudre ont dû être modifiées pour que les résultats numériques soient proches des valeurs expérimentales. La vivacité de la poudre, qui correspond au coefficient a_n de la loi de combustion ainsi que l'énergie chimique Q_c dégagée par la réaction de décomposition sont réduites, preuve que la modélisation physique des phénomènes liés à la balistique intérieure reste limitée.

Contrairement au cas du canon AGARD où nous avons étudié l'influence du maillage sur les résultats numériques et le comportement du système lorsque l'allumeur est simulé, nous allons ici simuler simplement le canon 40mm sous l'hypothèse de l'allumage parfait puis de l'allumage simulé avec les paramètres donnés dans [WCF⁺07]. Nos précédents résultats [NHHC07] montraient une vitesse du projectile plus élevée que la valeur expérimentale tandis que les maxima de pression étaient sous-estimés.

5.2.1 Allumage parfait

Dans cette section on considère l'allumage parfait du lit de poudre, c'est-à-dire que la poudre est allumée en tout point de la chambre à l'instant initial. La pression initiale est fixée à 5 MPa.

	500 × 1	500 × 5	Résultats de [WCF ⁺ 07]	Valeurs exp.
Pression culot max. (MPa)	333	358	293-439	-
Pression culasse max. (MPa)	434	466	365-561	428
Vitesse du projectile (m.s^{-1})	1205	1226	1221-1340	1234
Temps final (ms)	5.15	5.04	4.39-12.97	-

TAB. 5.8 – Canon 40mm : allumage parfait sur des maillages de dimension 500×1 et 500×5 .

Les résultats du tableau 5.8 montrent que les pressions sont dans l'intervalle des valeurs attendues mais que la vitesse calculée est légèrement inférieure à la vitesse mesurée. Sur un maillage de dimension 2, ce phénomène s'atténue. En choisissant une énergie dégagée par la réaction de combustion plus forte $Q_{ex} = 5.471 \text{ MJ/kg}$ (7.9 % de plus que la valeur initiale $Q_{ex} = 5.071 \text{ MJ/kg}$), les résultats numériques sur le maillage de 500 cellules sont en très bon accord avec les valeurs mesurées :

Pression culot max.	Pression culasse max.	Vitesse du projectile	Temps final
338 MPa	444 MPa	1234 m.s ⁻¹	5.64 ms

TAB. 5.9 – Canon 40mm : allumage parfait avec $Q_{ex} = 5.471$ MJ/kg. Maillage de dimension 500×1 .

La modification d'une valeur nous a permis d'améliorer les résultats. Cette manière de procéder est fréquente lors de simulations de problèmes en balistique intérieure même si cette méthode paraît peu rigoureuse. Comme les incertitudes sur la modélisation des phénomènes physiques liés à la combustion sont importantes, il est souvent nécessaire de "calibrer" le jeu de données d'entrée pour découvrir la source de l'erreur. Dans le cas présent, le fait d'augmenter les coefficients de la loi de combustion n'a pas permis d'améliorer les résultats, contrairement à ce qu'on observe avec une énergie Q_{ex} dégagée par la réaction plus élevée. Le transfert d'énergie de la phase solide à la phase gazeuse est donc mis en cause.

5.2.2 Allumage simulé

La charge propulsive est maintenant allumée par les gaz chauds issus de l'allumeur. Dans le cas de l'AGARD, nous avons modélisé l'allumeur par deux termes sources décrivant le débit de masse de gaz et l'énergie reçue par la chambre de combustion. Ces termes sources étaient fixés au début de la simulation, et ne tenaient pas compte de l'évolution des conditions dans la chambre de combustion.

Dans le cas présent, nous utilisons la condition aux limites de type "entrée subsonique" décrite précédemment. Il est donc nécessaire de connaître la densité et la pression des gaz à l'intérieur de l'allumeur, la vitesse d'éjection des gaz étant calculée à partir de l'équation (3.79) page 85. Pour cela, nous nous inspirons des équations du modèle de Gough pour construire un modèle simple à "zéro dimension d'espace", c'est-à-dire en considérant que les conditions dans l'allumeur sont homogènes, ce qui revient à résoudre des équations différentielles ordinaires en temps. Ce modèle est constitué des quatre équations

$$\frac{d}{dt} \alpha_{2,ign} = -\frac{1}{\rho_{2,ign}} \Gamma_{comb}, \quad (5.5a)$$

$$\frac{d}{dt} (\alpha_{1,ign} \rho_{1,ign}) = \Gamma_{comb}, \quad (5.5b)$$

$$\frac{d}{dt} (\alpha_{1,ign} \rho_{1,ign} e_{1,ign}) = \Gamma_{comb} \left(Q_{ex,ign} + \frac{p_{1,ign}}{\rho_{1,ign}} \right), \quad (5.5c)$$

$$\frac{d}{dt} d_{ign} = \dot{r}_{ign}. \quad (5.5d)$$

qui décrivent (dans l'ordre) le bilan de masse de gaz, de masse de poudre, d'énergie du gaz et l'épaisseur brûlée. Comme précédemment, on note α la fraction volumique, ρ la densité, p la pression et d l'épaisseur de poudre brûlée. L'indice ign désigne l'état à l'intérieur de

l'allumeur, 1 la phase gazeuse et 2 la phase solide. Le terme Γ_{comb} représente respectivement l'ajout de masse de gaz au travers de la combustion et la perte de masse de gaz par les événements de l'allumeur. Le taux de combustion $\dot{r}_{ign} = a_n p_{1,ign}^n$ suit la loi de Vieille.

L'allumeur a un rayon de 5mm et une longueur de 50mm, percé de deux événements répartis sur la longueur à $x = 10$ mm et $x = 35$ mm. À l'intérieur se trouvent 4.15 g de poudre noire dont les caractéristiques sont les suivantes

- particules : sphères de 1.77 mm de diamètre ;
- densité : 1700 kg/m³ ;
- énergie dégagée lors de la combustion : 1.3045 MJ/kg ;

Ne disposant pas de toutes les données nécessaires à la simulation, nous devons faire des hypothèses concernant certaines données. Les coefficients de la loi de combustion que nous utiliserons correspondent à ceux utilisés pour décrire la combustion de la poudre propulsive. On suppose également que les gaz issus de la combustion de la poudre noire ont les mêmes propriétés thermodynamiques que ceux dans la chambre de combustion.

On effectue les simulations avec les valeurs $Q_{ex,1} = 5.071$ MJ/kg et $Q_{ex,2} = 5.471$ MJ/kg utilisées pour les simulations d'allumage parfait.

	$Q_{ex,1}$	$Q_{ex,2}$	Résultats de [WCF ⁺ 07]	Valeurs exp.
Pression culot max. (MPa)	325	377	293-439	-
Pression culasse max. (MPa)	444	519	365-561	428
Vitesse du projectile (m.s ⁻¹)	1169	1237	1221-1340	1234
Temps final (ms)	27.39	26.85	4.39-12.97	-

TAB. 5.10 – Canon 40mm : simulations d'allumage réel pour $Q_{ex,1} = 5.071$ MJ/kg et $Q_{ex,2} = 5.471$ MJ/kg sur un maillage de dimension 500×1 .

	$Q_{ex,1}$	$Q_{ex,2}$	Résultats de [WCF ⁺ 07]	Valeurs exp.
Pression culot max. (MPa)	341	400	293-439	-
Pression culasse max. (MPa)	434	504	365-561	428
Vitesse du projectile (m.s ⁻¹)	1148	1214	1221-1340	1234
Temps final (ms)	9.97	9.50	4.39-12.97	-

TAB. 5.11 – Canon 40mm : simulations d'allumage réel pour $Q_{ex,1} = 5.071$ MJ/kg et $Q_{ex,2} = 5.471$ MJ/kg sur un maillage de dimension 500×5 .

Contrairement aux autres codes de calcul, nos résultats numériques ont tendance à sous-estimer la vitesse de sortie du projectile pour des pressions maximales équivalentes. Aucune explication n'est avancée pour l'instant. Du point de vue des résultats généraux, malgré les nombreuses inconnues du problème, les résultats restent tout de même cohérents.

5.3 Simulateur d'allumage

Après avoir simulé des tirs en une et deux dimensions d'espace, nous proposons maintenant de reproduire l'allumage d'une charge propulsive en trois dimensions d'espace. La nature tridimensionnelle des écoulements dans le chambre de combustion est liée à la géométrie des allumeurs : les événements sont généralement répartis sur toute la surface du capillaire. Nous souhaitons ici observer la propagation du front de flamme dans le lit de poudre pour un allumeur possédant quatre rangées de trois trous où chaque rangée est située sur la surface du tube avec un angle de $k\pi/2$ où $k \in \{0, 1, 2, 3\}$.

Nous considérons la chambre de combustion du canon AGARD 132mm, de longueur 762 mm et de diamètre 132 mm. L'allumeur est supposé de longueur 127 mm et de rayon 22 mm. Les trous de chaque rangée se situent à $x = 31.75$ mm, $x = 63.5$ mm et $x = 95.24$ mm de la culasse. Les propriétés de la poudre et du gaz restent les mêmes. L'allumeur est modélisé par les termes sources $\Gamma_{\text{ign}} = 1.03132 \cdot 10^5 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ et $Q_{\text{ign}} = 1.5702 \cdot 10^6 \text{ J/kg}$. Afin d'observer la répartition de la contrainte intergranulaire, la porosité critique est prise égale à la porosité initiale.

Les simulations sont réalisées sur un maillage de dimension $60 \times 20 \times 18$ où

- 60 est le nombre de cellules suivant la longueur de la chambre ;
- 20 est le nombre de cellules suivant le rayon de la chambre ;
- 18 est le nombre de cellules suivant la révolution de la chambre.

Le maillage correspondant est illustré par la figure 5.16.

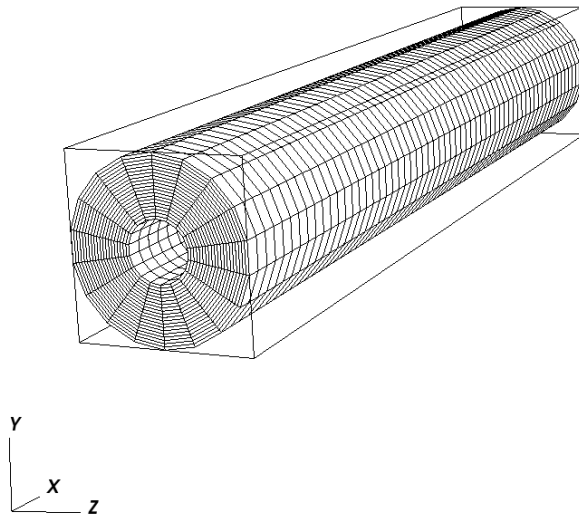


FIG. 5.16 – Simulateur d'allumage. Maillage tridimensionnel de la chambre de combustion.

L'évolution de la température de surface des grains de poudre est illustrée par la figure 5.17. Trois plans de coupe sont proposés pour $x = 0$, $y = 0$ et $z = 0$. On observe aisément

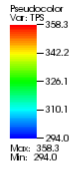
que la charge propulsive est allumée de façon hétérogène : l'allumage est plus rapide dans les directions radiales au niveau des événements. L'allumage de la poudre sera d'autant plus favorisé dans ces directions que l'on augmente la puissance de l'allumeur (en terme de débit ou d'énergie). L'hétérogénéité de l'allumage dans le lit de poudre amène l'apparition de forts gradients de pression. Nous voulons enfin étudier la répartition de la contrainte intergranulaire au cours du calcul, afin de vérifier numériquement que le système général est dans la plupart des cas non hyperbolique. On voit sur la figure 5.18 que les zones où le lit de poudre est compacté sont très localisées. Physiquement, l'expulsion des gaz par les événements de l'allumeur provoque une onde de compaction qui se propage dans le lit. Au moment où l'onde passe, la contrainte intergranulaire est activée et nous pouvons nous retrouver dans les poches d'hyperbolicité décrites dans le chapitre 1. Mais en dehors de cette onde, la contrainte intergranulaire définie dans le chapitre 3 est nulle, et on se retrouve dans le cas non hyperbolique.

5.4 Conclusion

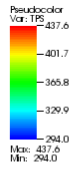
Nous avons tout d'abord effectué des simulations de tirs en une ou deux dimensions d'espace (sous l'hypothèse d'axisymétrie). Les résultats numériques obtenus sont semblables aux résultats déjà obtenus précédemment par d'autres codes de calcul. Les simulations fournissent de bonnes prévisions des maxima de pression ainsi que de la vitesse de sortie du projectile, mais nécessitent, comme souvent lors de campagnes de simulations, un calibrage des paramètres de calculs. Les données concernant la géométrie du système de propulsion sont bien maîtrisées mais certaines propriétés de la poudre et des gaz le sont beaucoup moins, en particulier pour pouvoir appliquer notre critère d'allumage, impossible jusqu'à présent.

Du point de vue numérique, nous avons testé plusieurs configurations de maillages et de modèles d'allumeurs. Notre code ne souffre pas du passage la dimension 1 à la dimension 2. Cette capacité provient de la construction de notre maillage considéré comme tridimensionnel quelque soit le cas étudié. Nous proposons deux approches différentes pour modéliser le fonctionnement de l'allumeur. L'ajout de termes sources aux équations décrivant l'écoulement gaz-poudre ne présente pas de difficultés de mise en œuvre et ne provoque pas d'instabilités de notre algorithme. La condition aux limites de type entrée subsonique présentée dans le chapitre 3 donne des résultats satisfaisants même si dans certains cas des oscillations numériques apparaissent. Des efforts doivent encore être fournis pour résoudre ce problème.

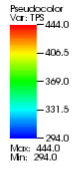
La possibilité de simuler les écoulements de gaz chauds issus de l'allumeur en trois dimensions d'espace est très satisfaisante. On peut ainsi étudier l'impact de la géométrie de l'allumeur sur l'évolution de l'allumage du lit de poudre propulsive. Les avantages sont doubles : éviter la fabrication de mauvais prototypes d'allumeurs et évaluer les ondes de pressions qui peuvent entraîner un dysfonctionnement du système. Les résultats proposés sont quantitatifs et sont cohérents avec les comportements prévus. La comparaison des résultats numériques avec les mesures expérimentales sera bientôt effectuée.



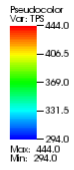
$t = 0.048$ ms



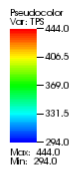
$t = 0.123$ ms



$t = 0.372$ ms



$t = 0.668$ ms



$t = 0.943$ ms



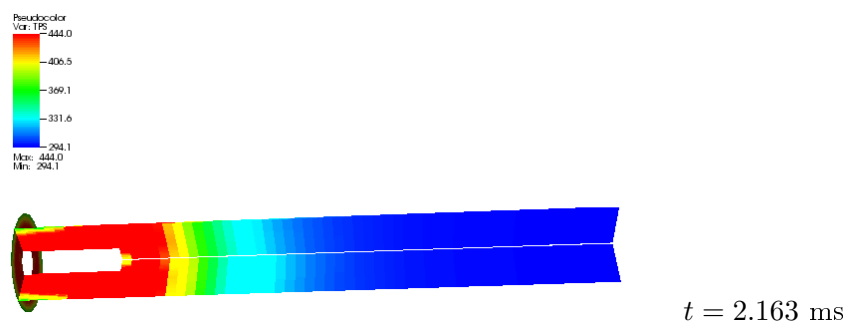


FIG. 5.17 – Évolution du front de flamme dans le lit de poudre en 3 dimensions d'espace. Tracé de la température de surface des grains au cours du temps.

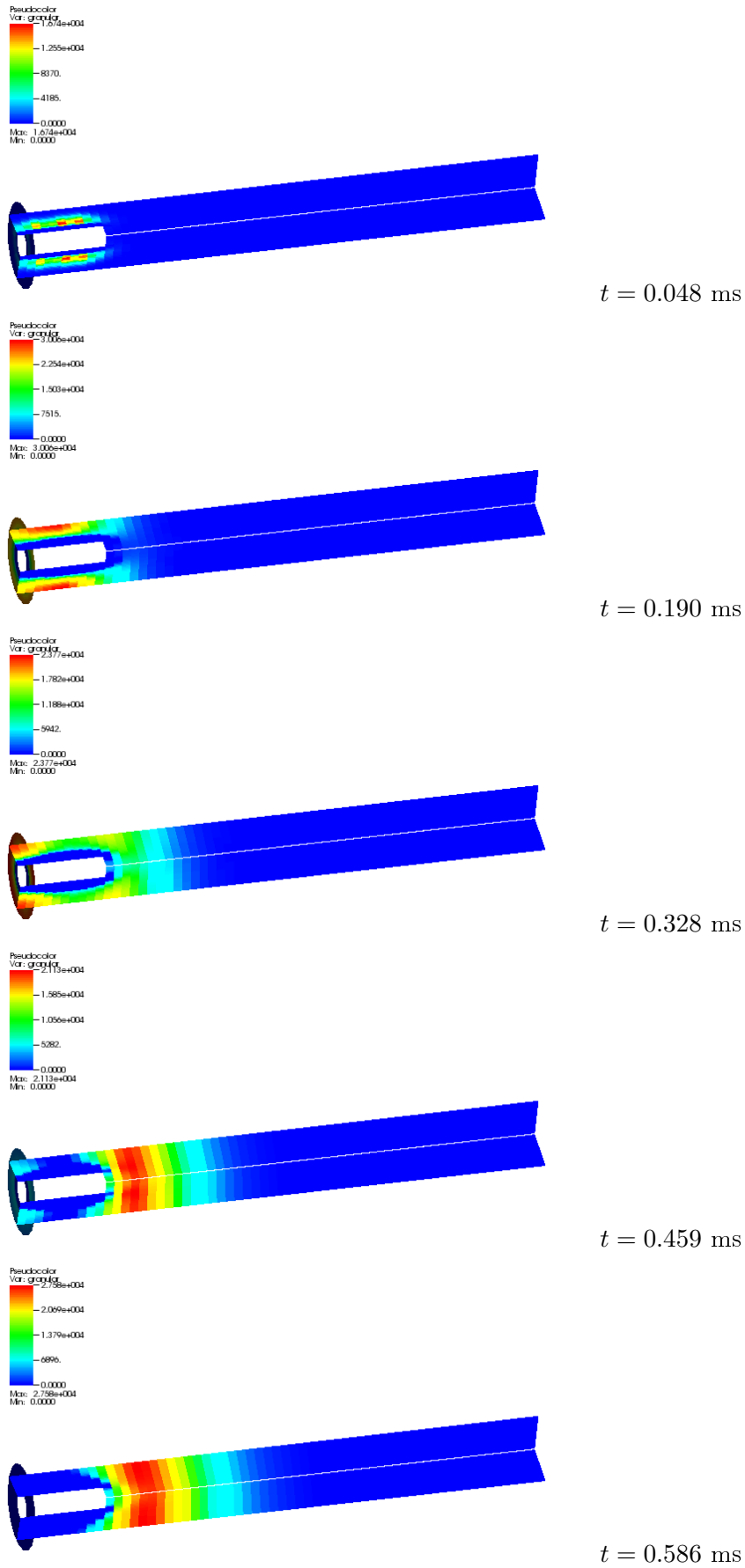


FIG. 5.18 – Évolution de la contrainte intergranulaire en 3 dimensions d'espace.

Conclusions et perspectives

Ces travaux de thèse ont offert l'opportunité d'aborder deux parties très différentes des études des écoulements réactifs gaz-poudre appliqués aux problèmes de balistique intérieure. La modélisation de l'écoulement diphasique général nous a confronté à divers problèmes mathématiques intrinsèques aux modèles choisis (non conservatifs, domaine d'hyperbolicité restreint) que nous avons dû surmonter. L'étude des phénomènes d'allumage et de combustion nous a permis de plonger au cœur des mécanismes physiques et chimiques qui permettent à la poudre propulsive de s'enflammer.

Les applications de notre code de calcul imposent la possibilité de simuler des écoulements tridimensionnels dans des géométries cylindriques à section variable (voir discontinue) et à paroi mobile. Pour éviter de modifier le système d'équations en fonction de la dimension du problème considéré, nous optons pour l'approche la plus générale possible : nous résolvons toujours les équations en trois dimensions d'espace, la construction du maillage déterminant la dimension réelle du problème. Ainsi, en fonction de la discrétisation choisie pour le maillage suivant les trois directions de l'espace (\vec{r} , $\vec{\theta}$, \vec{z}) en coordonnées cylindriques, nous sommes en mesure de simuler indépendamment des problèmes en 1D, 2D ou 3D. Des cas tests monophasiques sur des maillages à section variable ou discontinue montrent les possibilités d'une telle approche. Le déplacement du projectile, et donc l'évolution du maillage, a été l'objet de deux méthodes distinctes. Dans un premier temps, nous avons utilisé une méthode de rezoning qui consiste à dilater le maillage initial au cours de la simulation. Cette méthode, facile à appliquer en une dimension d'espace, est plus délicate à mettre en œuvre dans le cas tridimensionnel. Nous avons alors choisi une méthode d'ajout de mailles : les volumes frontières au culot du projectile sont dilatés, puis divisés en deux lorsque leur longueur devient le double de la longueur initiale. L'algorithme de création de mailles est simple et particulièrement bien adapté à notre maillage en trois dimensions d'espace.

Concernant l'aspect mathématique des modèles d'écoulements gaz-poudre, la nature des systèmes ne nous a pas permis d'utiliser les schémas numériques classiques. Décrit dans un premier temps par le modèle à une pression de Gough [Gou79], le système est non conservatif et conditionnellement hyperbolique. Nous sommes en dehors du cadre théorique de l'étude des systèmes conservatifs hyperboliques. Il a donc été nécessaire de développer une méthode pour calculer la contribution des termes non conservatifs (les singularités dans les dérivées aux interfaces des cellules nécessitent la détermination de relations de saut) et les flux numériques conservatifs (les valeurs et vecteurs propres utilisés par les schémas numériques sont

complexes dans les cas non hyperboliques).

En adaptant les travaux de Combe et Hérard [CH99], nous calculons la contribution des termes advectifs non conservatifs par un simple schéma centré. De manière générale, des relations de saut au travers de chocs doivent être établies, et nécessitent de connaître en détail les caractéristiques des ondes qui se propagent. Dans notre cas, cette méthode simple est applicable car aucun choc n'apparaît lors du fonctionnement normal d'un système de propulsion.

Nous avons utilisé le schéma de Rusanov, puis HLL, pour calculer les flux conservatifs. Nous nous sommes tournés vers ces schémas à forte viscosité numérique et donc à faible précision car dans les cas non hyperboliques, nous gagnons légèrement en stabilité sur maillages grossiers, ce qui n'empêchera pas la solution d'exploser sur des maillages fins. Ces schémas nécessitent de connaître les valeurs propres du système d'advection, qui deviennent complexes lorsqu'on sort du domaine d'hyperbolicité. Nous contourrons d'abord ce problème en utilisant les valeurs propres associées aux équations d'Euler. Cette solution peu rigoureuse a rapidement été remplacée par une méthode à pas fractionnaires, qui consiste à décomposer le système général de départ conditionnellement hyperbolique en deux sous-systèmes hyperboliques. La résolution se fait alors en trois étapes successives (chaque sous-système puis les termes sources) où la condition initiale pour chaque étape correspond à l'état calculé à l'étape précédente. De cette manière, les valeurs propres à chaque étape sont donc toujours réelles et les flux numériques conservatifs peuvent donc être calculés grâce à leur expression analytique. De plus, chaque sous-système respecte le principe du maximum, ce qui nous assure que la porosité reste dans l'intervalle $[0; 1]$, physiquement admissible. Il est possible d'utiliser alors des schémas numériques plus précis, mais comme le système général reste conditionnellement hyperbolique, nous serons toujours limités en taille de maillage.

Au travers de divers cas tests diphasiques, nous montrons numériquement que la méthode à pas fractionnaires a amélioré la stabilité de la méthode numérique d'approximation du système général, même si, en raffinant le maillage, la solution discrète divergera également. L'étude théorique du domaine d'hyperbolicité est complétée par l'étude numérique de l'influence de la contrainte intergranulaire. Le rôle stabilisateur de la force de traînée (qui réduit la vitesse relative entre les phases) est aussi vérifié.

Nous avons ensuite appliqué une méthode de relaxation à un modèle non conservatif strictement hyperbolique. Ce modèle général à sept équations qui considère deux pressions et deux vitesses différentes pour chacune des phases peut être réduit à six équations par l'élimination de l'équation d'évolution de la fraction volumique à l'aide d'une relation algébrique qui relie les deux pressions en tenant compte d'une contrainte intergranulaire. Ce système à six équations devient conditionnellement hyperbolique, voir même strictement non hyperbolique dans le cas où la contrainte granulaire disparaît. Nous proposons d'utiliser une méthode de relaxation de pression qui consiste à ajouter un terme source à l'équation d'évolution de la fraction volumique. Ce terme source équilibre les pressions, d'une manière qu'on suppose instantanée. Une méthode à pas fractionnaires permet de résoudre le système en trois étapes successives (partie advective, relaxation puis termes sources).

Les deux pressions suivent une loi des gaz raides et sont liées, comme dans le modèle de Gough, par une relation algébrique qui tient compte d'une contrainte intergranulaire. Sous certaines hypothèses, on propose une expression de cette contrainte qui permet non seulement de respecter le principe du maximum, mais en plus d'assurer l'existence et l'unicité de la fraction volumique calculée après l'étape de relaxation. Sa présence permet également d'étendre le domaine d'hyperbolicité du modèle à six équations sans pour autant supprimer toutes les poches d'ellipticité. Les premières simulations de cas simplifiés de balistique intérieure sont prometteuses et l'extension du modèle à des cas plus réalistes ne nécessite plus que quelques développements pour pouvoir traiter des lois d'état différentes et des termes sources plus complexes.

Concernant la modélisation des phénomènes d'allumage et de combustion des poudres propulsives, une partie des travaux porte sur la définition d'un nouveau critère d'allumage plus réaliste que ceux utilisés jusqu'à présent dans la plupart des codes de balistique intérieure. Les critères usuels sont définis à partir de mesures dont les conditions expérimentales ne représentent pas celles rencontrées dans une chambre de combustion. Nous proposons un modèle adapté des travaux de Lengellé [LBDA91] basé sur un bilan d'énergie à la surface d'un grain de poudre. Ce critère tient compte des paramètres physiques et chimiques de la poudre au travers d'une modélisation simplifiée de la réaction chimique de décomposition de la poudre en gaz. Il tient compte également de l'évolution du flux de chaleur reçu à la surface qui influence grandement le délai d'initiation de la combustion. Pour pouvoir intégrer ce modèle dans notre code de calcul diphasique sans trop pénaliser le temps de calcul, nous détaillons un algorithme rapide basé sur certaines approximations concernant le profil de la température à l'intérieur du grain pour déterminer si la poudre est allumée ou non. La validation de ce critère est réalisée à partir de données issues de la littérature. Le manque de données concernant les poudres utilisées à l'ISL ne nous permet pas, pour l'instant, de confronter les simulations à des mesures expérimentales. Des travaux sont en cours pour combler ce manque, concernant en particulier l'énergie d'activation et le facteur préexponentiel de la réaction de décomposition.

La modélisation de l'allumage à l'aide d'une réaction chimique de décomposition en phase solide nous a naturellement conduits à compléter le cycle de transformation du matériau énergétique solide en gaz inerte par une deuxième réaction chimique, cette fois-ci en phase gazeuse. Ainsi, nous tenons compte du flux de chaleur fourni par la source extérieure, mais également du flux de chaleur perçue à la surface et provenant de la flamme qui s'établit au moment de l'allumage. Cette approche, plus complexe, fait donc intervenir deux réactions chimiques consécutives : décomposition du solide énergétique en gaz réactif, puis en gaz inerte. Nous sommes alors obligés de considérer les équations décrivant l'évolution de la fraction volumique de solide réactif et de la température en phase solide et en phase gazeuse. Sous diverses hypothèses décrites dans le chapitre 2, le nouveau modèle permet de simuler non seulement l'allumage des poudres, mais également l'évolution de la combustion à basse pression. En effet, la loi de Vieille, classique dans le domaine balistique, exprime la vitesse de combustion comme fonction de la pression. Elle reproduit très bien l'évolution de la vitesse de combustion dans un intervalle de pressions relativement fortes. Or, au début de la combustion, lorsque la pression

dans la chambre est encore faible, le mécanisme de décomposition est piloté principalement par la température. Notre modèle est donc une alternative à la loi de Vieille pour les faibles pressions, car il tient compte aussi de la température du gaz.

Comme pour le critère d'allumage, il est pour l'instant difficile de proposer une validation rigoureuse car les données concernant les réactions en phase gazeuse sont également difficiles à obtenir. Nous nous restreignons à une validation quantitative de notre modèle, en étudiant le comportement du modèle lorsqu'il est soumis à plusieurs scénarii possibles. Le modèle réagit en accord avec les prévisions et laisse présager une future utilisation possible dans les codes de balistique intérieure.

Les modèles physiques proposés représentent un progrès par rapport aux critères développés précédemment, mais beaucoup de points d'ombre restent à éclaircir dans la modélisation des mécanismes d'allumage et de combustion, car difficiles à observer ou à mesurer expérimentalement. Nous citons par exemple les cas du flux de chaleur réellement absorbé à la surface, la modélisation de l'ensemble des réactions chimiques mises en jeu pendant la combustion ou l'interaction entre les phases (force de traînée) ou dans les phases (contrainte intergranulaire). De gros efforts doivent être fournis pour pouvoir proposer une modélisation fine des phénomènes d'allumage et de combustion, qui pourront ensuite être implémentés dans des codes de simulation d'écoulements réactifs gaz-poudre.

Concernant les performances générales de notre code de calcul, les résultats sont très satisfaisants. En une et deux dimensions d'espace, les résultats numériques sont équivalents aux autres codes de calcul, car nous rencontrons les mêmes difficultés pour reproduire les résultats expérimentaux. La validation en plusieurs étapes de l'intégrateur numérique nous permet d'écarter l'hypothèse de problèmes numériques. Nous mettons donc en cause la modélisation des phénomènes physiques ayant lieu dans l'écoulement, encore trop approximative, ainsi que le manque de données nécessaires à notre modèle d'allumage. Toutefois, le code est organisé de façon à pouvoir facilement modifier les équations constitutives des termes sources. Les mises à jour et la maintenance seront donc aisées.

Un avantage fondamental de notre approche est la possibilité de simuler des écoulements dans des géométries complexes en trois dimensions d'espace. Cette possibilité prend toute son importance pour la simulation de l'inflammation du lit de poudre par divers allumeurs. Nous sommes maintenant en mesure d'étudier le fonctionnement d'un allumeur dont les événements sont répartis d'une façon quelconque sur sa surface. Simuler l'écoulement des gaz chauds issus de l'allumeur nous permet de prévoir l'évolution du front de flamme dans le lit de poudre. Les gradients de pression à l'intérieur de la chambre, indicateurs de la qualité de l'allumage, peuvent ainsi être évalués numériquement. Du point de vue pratique, prédire les performances en termes d'oscillations de pression permet d'éviter certains dysfonctionnements inattendus du système (aspect sécurité), ainsi que la fabrication inutile de prototypes (aspect coût).

Bibliographie

- [AW04] N. Andrianov and G. Warnecke. On the solution to the riemann problem for the compressible duct flow. *SIAM Journal of Applied Mathematics*, 64(3) :878–901, 2004.
- [BDL96] R. Bellec, J. Duterque, and G. Lengellé. Modélisation de la combustion des propergols aluminisés. Technical Report RT 37/7128 EN, ONERA, Novembre 1996.
- [BDP70] M.W. Beckstead, R.L. Derr, and C.F. Price. A model of composite solid-propellant combustion based on multiple flames. *AIAA Journal*, 8(12) :2200–2207, 1970.
- [BDP71] M.W. Beckstead, R.L. Derr, and C.F. Price. The combustion of solid monopropellants and composite propellants. In Thirteenth Symposium (International) on Combustion, editor, *The Combustion Institute*, pages 1047–1056, 1971.
- [BGH96] T. Buffard, T. Gallouët, and J.M. Hérard. A sequel to a Rough Godunov Scheme : Application to Real Gases. *Computers and Fluids*, 29(7), 1996.
- [BHSU96] G. Brun, J.M. Hérard, L. Leal De Sousa, and M. Uhlmann. Numerical modeling of turbulent compressible flows using second order models. Rapport edf he41/96/037/a, EDF Chatou, 1996.
- [BN86] M.R. Baer and J.W. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration to detonation (DDT) transition in reactive granular materials. *Int. J. Multiphase Flow*, 12(6) :861–889, 1986.
- [Bra07] B. Braconnier. *Modélisation numérique d’écoulements multiphasiques pour des fluides compressibles, non miscibles soumis aux effets capillaires*. PhD thesis, Université de Bordeaux I, 2007.
- [Bre00] M.Q. Brewster. Solid Propellant Combustion Response : Quas-Steady (QSHOD) Theory Development and Validation. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 185 :607–638, 2000.
- [BS95] M.Q. Brewster and S.F. Son. Quasi-steady combustion modeling of homogeneous propellants. *Combustion and Flame*, 103 :11–26, 1995.
- [BWS97] M.Q. Brewster, M.J. Ward, and S.F. Son. New paradigm for simplified combustion modeling of energetics solids : Branched chain gas reaction. In 33rd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, editors, *AIAA Paper 97-3333*, Seattle, 1997.

- [BWS00] M.Q. Brewster, M.J. Ward, and S.F. Son. Simplified combustion modeling of double base propellant : gas phase chain reaction vs. Thermal decomposition. *Combustion Science and Technology*, 154 :1–30, 2000.
- [Ca81] C. Cuche and al. "MOBIDIC" : a french interior ballistics code based on a two-phase flow model. In *6th International Symposium on Ballistics*, Orlando, Etats-Unis, Octobre 1981.
- [Car00] A. Carrière. Sur l'évolution des modèles de Balistique Intérieure de Paul Vieille à nos jours, et leur validation sur diverses armes, des pistolets au canon de Jules Verne. In *3èmes Journées Scientifiques Paul Vieille*, Paris, France, octobre 2000.
- [CEAG⁺97] F. Coquel, K. El Amine, E. Godlewski, B. Perthame, and P. Rascle. A numerical method using upwind schemes for the resolution of two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 136(2) :272–288, 1997.
- [CH99] L. Combe and J.M. Hérard. Finite Volume Algorithm to Compute Compressible Gas-Solid Flows. *AIAA Journal*, 37(3) :337–345, mars 1999.
- [CJ59] H.S. Carslaw and J.C. Jeger. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford Clarendon Press, 1959.
- [CLS04] A. Chinnayya, A.-Y. LeRoux, and N. Seguin. A well-balanced scheme for the approximation of the shallow-water equations with topography : the resonance phenomenon. *International Journal of Finite Volumes*, 1(1) :1–27, 2004.
- [Com97] L. Combe. *Simulation numérique d'écoulements gaz-particules sur maillage non structuré*. PhD thesis, Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse / Département Laboratoire National d'Hydraulique EDF Chatou, 1997.
- [Daf73] C. Dafermos. The entropy rate admissibility criterion for solutions of hyperbolic conservation laws. *J. Diff. Eqs.*, 14 :202–212, 1973.
- [DB61] R.M. Denison and E. Baum. A simplified model of unstable burning in solid propellants. *ARS Journal*, 31(8) :1112–1122, 1961.
- [Die68] J. Dieudonné. *Calcul Infinitésimal*. Hermann, 1968.
- [DL88] F. Dubois and P.G. LeFloch. Boundary conditions for nonlinear hyperbolic systems of conservation laws. *J. Differential Equations*, 71(1) :93–122, 1988.
- [Dub01] F. Dubois. Partial riemann problem, boundary conditions and gas dynamics. In *Absorbing Boundaries and Layers, Domain Decomposition Methods. Applications to Large Scale Computations*, Loïc Tournette and Laurence Halpern, eds., pages 16–77. Nova Science Publishers, Inc., New York, 2001.
- [ED72] E.R.G Eckert and R.M. Drake. *Analysis of heat and mass transfer*. Mc Graw Hill, New-York, 1972.
- [Erg52] S. Ergun. Fluid flow through packed columns. *Chem. Eng. Prog.*, 48 :89–96, 1952.
- [FHL97] A. Forestier, J.M. Hérard, and X. Louis. Solveur de type Godunov pour simuler les écoulements turbulents compressibles. *C.R. Acad. Sci. Paris - Série I*, t. 324 :919–926, 1997.

- [FL92] P. Le Floch and T.P. Liu. Existence theory for non linear hyperbolic systems in nonconservative form. *Pub. Ecole Polytechnique - Centre de Mathématiques Appliquées*, 254, 1992.
- [Flo88] P. Le Floch. Entropy weak solutions ton non linear hyperbolic systems under nonconservative form. *Commun. Partial Diff. Equations*, 13(6) :669–727, 1988.
- [GE71] N.I. Gelperin and V.G. Einstein. *Heat Transfer in fluidized beds*. J.F. Davidson et D. Harrison Ed., New-York, 1971.
- [GHS03] T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. A hybrid scheme to compute contact discontinuities in one-dimensional Euler systems. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 36(6) :1133–1159, 2003.
- [GHS04] T. Gallouët, J.M. Hérard, and N. Seguin. Numerical modeling of two-phase flows using the two-fluid two-pressure approach. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 14(5) :663–700, 2004.
- [Gia00] M. Di Giacinto. Numerical Simulation of Solid Motor Ignition Transient. In *5th International Symposium on Special Topics in Chemical Propulsion : Combustion of Energetic Material*, Stresa, Italie, Juin 2000.
- [Gid94] D. Gidaspow. *Multiphase Flow and Fluidization*. Academic Press, 1994.
- [Gio99] V. Giovangigli. *Multicomponent Flow Modeling*. Birkhäuser, Boston, 1999.
- [GL06] H. Guillard and M. Labois. Numerical modelling of compressible two-phase flows. In *European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 2006*, 2006.
- [GM96] T. Gallouët and J.M. Masella. Un schéma de Godunov approché. *C.R. Acad. Sci. Paris, Série I*, t. 323 :77–84, 1996.
- [God59] S.K. Godunov. A difference method for numerical calculation of discontinuous equations of hydrodynamics. *Math. Sbornik*, 47(89) :271–300, 1959.
- [Goo64] T.R. Goodman. Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer. In JR (eds) J.P. Hartner, T.F. Irvine, editor, *Advances in Heat Transfer*, volume 1, pages 52–122. Academic Press, 1964.
- [Gou79] P.S. Gough. Modeling of two-phase flows in guns. *AIAA*, 66 :176–196, 1979.
- [GR91] E. Godlewski and P.A. Raviart. *Hyperbolic systems of conservation laws*. coll. SMAI nř3/4. Ellipses, 1991.
- [GR96] E. Godlewski and P.A. Raviart. *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*. volume 118 of Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, 1996.
- [GS02] S. Gavrilyuk and R. Saurel. Mathematical and numerical modelling of two-phase compressible flows with inertia. *J. Comp. Phys.*, 175(1) :326–360, 2002.
- [GSG96] A. Goldstein, M. Shapiro, and C. Gutfinger. Mechanics of collisional motion of granular materials. Part 3. self similar shock wave propagation. *Journal of Fluid Mechanics*, 316 :29–51, 1996.

- [GSS99] J. Glimm, D. Saltz, and D.H. Sharp. Two phase flow modelling of a fluid mixing layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 378 :119–143, 1999.
- [GZ79] P. S. Gough and F. J. Zwarts. Modeling of heterogenous two-phase flow. *AIAA*, 17(1) :17–25, 1979.
- [HCB54] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss, and R.B. Bird. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. John Wiley & Sons, New-York, London, 1954.
- [HFL94] J.M. Hérard, A. Forestier, and X. Louis. A non-strictly hyperbolic system to describe compressible turbulence. Rapport edf he41/94.11a, EDF Chatou, 1994.
- [HH85] R. Heiser and D. Hensel. AMI : Ein achsensymmetrisches Modell der Innenballistik. Rapport technique 502/81, Institut franco-allemand de recherche de Saint-Louis, 1985.
- [HH86] D. Hensel and R. Heiser. AMI : a general gasdynamic model of internal ballistics of guns. In *3rd Anglo-American Meeting on International Ballistics Information Exchange*, Nuernberg, Allemagne, Juin 1986.
- [HH05] J.M. Hérard and O. Hurisse. A Relaxation Method to Compute Two-Fluid Models. Technical Report HI-81/05/02/A, EDF, 2005.
- [HLL83] A. Harten, P.D. Lax, and B. Van Leer. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review*, 25(1) :35–61, 1983.
- [Hér95] J.M. Hérard. Solveur de Riemann approché pour pour un système hyperbolique non conservatif issu de la turbulence compressible. Rapport edf he41/95/009/a, EDF Chatou, 1995.
- [Hur06] O. Hurisse. *Couplage interfacial instationnaire de modèles diphasiques*. PhD thesis, Université Aix-Marseille I, octobre 2006.
- [ID02] F.P. Incropera and D.P. Dewitt. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. Wiley-VCH, 2002.
- [JBH00] T.L. Jackson, J. Buckmaster, and J. Hoeflinger. Three dimensionnal flames supported by heterogeneous propellants. In Proceedings of the Combustion Institute, editor, *The Combustion Institute*, volume 28, 2000.
- [JMB04] T.L. Jackson, L. Massa, and M.Q. Brewster. Unsteady combustion modelling of energetic solids, revisited. *Combustion Theory Modelling*, 8 :513–532, 2004.
- [Kay05] A. Kay. Étude de l’influence des charges propulsives à haute densité de chargement. Technical Report RV 241/2005, ISL, Août 2005.
- [KB59] F. Kreith and W.Z. Black. *Basic Heat Transfer*, pages 136–191. Harper & Row, 1959.
- [Kis57] H.E. Kissinger. Reaction kinetics in differential thermal analysis. *Analytical Chemistry*, 29(11) :1702–1706, 1957.
- [KMB⁺01] A. K. Kapila, R. Menikoff, J. B. Bdzil, S. F. Son, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : reduced equations. *Physics of Fluids*, 13(10) :3002–3024, 2001.

- [Kra83] G. Krauth. Nichtstationäre Rohrströmungen mit Verbrennung. Rapport r118/83, Institut Franco-Allemand de Recherche de Saint-Louis, France, 1983.
- [KRT76] H. Krier, S. Rajan, and W.F. Van Tassel. Flame Spreading and Combustion in packed beds of propellant grains. *AIAA Journal*, 14(3) :301–309, 1976.
- [KSB⁺97] A.K. Kapila, S.F. Son, J.B. Bdzil, R. Menikoff, and D.S. Stewart. Two-phase modeling of DDT : Structure of the velocity-relaxation zone. *Phys. Fluids*, 9(12) :3885–3897, 1997.
- [Kub02] N. Kubota. *Propellants and Explosives*. Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2002.
- [Kum93] A. Kumbaro. *Modélisation, analyse mathématique et numérique des modèles bi-fluides d'écoulements diphasiques*. PhD thesis, Thèse de Doctorat de l'Université Paris XI, 1993.
- [Lax72] P.D. Lax. Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves. In *CBMS Regional Conf. Ser. In Appl. Math. 11*, Philadelphia, 1972. SIAM.
- [LBDA91] G. Lengellé, A. Bizot, J. Duterque, and J.C. Amiot. Allumage des propergols solides. *La Recherche Aérospatiale*, 2 :1–20, 1991.
- [LBDT84] G. Lengellé, A. Bizot, J. Duterque, and J.F. Trubert. *Steady-state burning of homogeneous propellants*, volume 90, chapter 7. 1984.
- [LDGT91] G. Lengellé, J. Duterque, J.C. Godon, and J.F. Trubert. La combustion des propergols solides. In *AGARD Lecture Series*, number 180. Septembre 1991.
- [LDT00] G. Lengellé, J. Duterque, and J.F. Trubert. *Physico-Chemical Mechanisms of Solid Propellant Combustion*, volume 185. AIAA, 2000.
- [LeF89] P.G. LeFloch. Shock waves for nonlinear hyperbolic systems in non-conservative form. Technical report, Institute for Math. Appl., IMA Minneapolis, 1989.
- [Len70] G. Lengellé. Thermal degradation kinetics and surface pyrolysis of vinyl polymers. *AIAA Journal*, 8 :1989–1998, 1970.
- [LK94] Y.C. Lu and K.K. Kuo. Modeling and Numerical Simulation of Combustion Process Inside a Solid-Propellant Crack. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 19 :217–226, 1994.
- [Lou95] X. Louis. *Modélisation numérique de la turbulence compressible*. PhD thesis, Thèse de Doctorat de l'Université Paris VI, 1995.
- [Mad98] C.L. Mader. *Numerical modeling of explosives and propellants, 2nd edition*. CRC Press, Boca Raton, USA, 1998.
- [Mas97] J.M. Masella. *Quelques méthodes numériques pour les écoulements diphasiques bi-fluides en conduites pétrolières*. PhD thesis, Thèse de Doctorat de l'Université Paris VI, 1997.
- [MFG99] J.M. Masella, I. Faille, and T. Gallouët. On a rough Godunov scheme. *International Journal of Computational Fluid*, 12 :133–149, 1999.
- [MLM95] G. Dal Maso, P.G. LeFloch, and F. Murat. Definition and weak stability of non conservative products. *J. Math. Pures Appl.*, 74 :483–548, 1995.

- [MNRS03] G.B. Manelis, G.M. Nazin, Y.I. Rubtsov, and V.A. Strunin. *Thermal decomposition and combustion of explosives and propellants*. Taylor&Francis, London and New-York, 2003.
- [NFC07] J. Nussbaum, P. Franco, and A. Carrière. Powder ignition modelling in interior ballistic problem. In *21st Int. Colloquium on the Dynamics of Explosives and Reactive Systems*, Poitiers, France, Juillet 2007.
- [NHHC06] J. Nussbaum, P. Helluy, J.-M. Hérard, and A. Carrière. Numerical simulations of gas-particle flows with combustion. *Journal of Flow, Turbulence and Combustion*, 76(4) :403–417, 2006.
- [NHHC07] J. Nussbaum, P. Helluy, J.-M. Hérard, and A. Carrière. Numerical simulations of reactive two-phase gas-particle flows. *AIAA Paper 2007 – 4161*, 2007.
- [NTI79] T. Niioka, M. Takahashi, and M. Izumikawa. Ignition of double-base propellant in a hot stagnation-point flow. *Combustion and Flame*, 35 :81–87, 1979.
- [Nus06] J. Nussbaum. Theoretical study of ignition process. Technical Report AT Combustion Phenomena 100 059, Institut franco-allemand de recherche de Saint-Louis, Bourges, mai 2006.
- [Nus07] J. Nussbaum. Tâche 9 : affinage des modèles d’allumage et de combustion. Technical Report CR/RV 405/2007, Institut franco-allemand de recherche de Saint-Louis, Saint-Louis, 2007.
- [Oza65] T. Ozawa. A new Method of analyzing thermogravimetric data. *Combustion and Flame*, 35 :81–87, 1965.
- [PBHF64] E.W. Price, H.H. Bradley, J.D. Hightower, and R.O. Fleming. Ignition of Solid Propellants. *AIAA Preprints*, (64) :120, 1964.
- [PKCS73] A. Peretz, K.K. Kuo, L.H. Caveny, and M. Summerfield. Starting Transient of Solid-Propellant Rocket Motors with High Internal Gas Velocities. *AIAA Journal*, 11(12) :1719–1727, 1973.
- [Por88] B. Porterie. *Modélisation de la phase d’allumage d’une charge propulsive en balistique intérieure*. PhD thesis, Université d’Aix Marseille 1, 1988.
- [PR00] P. Della Pietra and C. Reynaud. Numerical investigations for modeling interior ballistics two-phase flow. In *European Forum on Ballistics of Projectiles*, Saint-Louis, France, Avril 2000.
- [PV05] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, 2005.
- [Rep82] Technical Report. Fluid Dynamic Aspects of Internal Ballistics. *AGARD Advisory Report No. 172 (AGARD-AR-172)*, novembre 1982.
- [Roe81] P. L. Roe. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 43(2) :357–372, 1981.
- [SA99a] R. Saurel and R. Abgrall. A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. *J. Comp. Phys.*, 150 :425–467, 1999.

- [SA99b] R. Saurel and R. Abgrall. A simple method for compressible multifluid flows. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 21(3) :1115–1145, 1999.
- [Sai95] L. Sainsaulieu. Contribution à la modélisation mathématique et numérique des écoulements diphasiques constitués d’un nuage de particules dans un écoulement de gaz. Thèse d’habilitation, Paris VI, 1995.
- [Sai96] L. Sainsaulieu. Traveling-wave solutions of convection-diffusion systems in non-conservative form. *SIAM J. Math. Anal.*, 27(5) :1286–1310, 1996.
- [Sim95] O. Simonin. Modélisation numérique des écoulements turbulents diphasiques à inclusions dispersées. *École de printemps de mécanique des fluides numérique*, 1995.
- [tec85] Rapport technique. Fonctions de forme géométrique des poudres. *CE/DMS/MMB/TDP 13/85*, novembre 1985.
- [TK96] I. Toumi and A. Kumbaro. An approximate linearized Riemann solver for a two-fluid model. *J. Comput. Phys.*, 124 :286–300, 1996.
- [Tor99] E.F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics, 2nd edition*. Springer, 1999.
- [Tou89] I. Toumi. *Etude du problème de Riemann et construction de schémas type Godunov multidimensionnels pour des modèles d’écoulements diphasiques*. PhD thesis, Thèse de Doctorat de l’Université Paris VI, 1989.
- [TS70] C.L. Thompson and N.P. Shun. The interaction of thermal radiation and M-2 double base solid propellant. *Combustion Science and Technology*, 2 :59–66, 1970.
- [Vie93] P. Vieille. Etude sur le mode de combustion des substances explosives, 1893.
- [WBT05] J.W. Weber, M.Q. Brewster, and K.C. Tang. Radiative ignition and extinction dynamics of energetic solids. *Journal of Thermophysics and Heat Transfert*, 19(3) :257–265, 2005.
- [WC84] P. Woodward and P. Colella. The numerical simulation of two-dimensional fluid with strong shocks. *Journal of Computational Physics*, 54 :115–173, 1984.
- [WCF⁺05] C. Woodley, A. Carrière, P. Franco, T. Gröger, D. Hensel, J. Nussbaum, S. Kelzenberg, and B. Longuet. Comparisons of internal ballistics simulations of the agard gun. In *22nd International Symposium on Ballistics*, Vancouver, Canada, novembre 2005.
- [WCF⁺07] C. Woodley, A. Carrière, P. Franco, J. Nussbaum, X. Chabaux, and B. Longuet. Comparisons of internal ballistics simulations of 40mm gun firings. In *23rd International Symposium on Ballistics*, Tarragone, Espagne, avril 2007.
- [Wil73] F.A. Williams. Quasi-steady gas-phase flame theory in unsteady burning of a homogeneous solid propellant. *AIAA Journal*, 11(9) :1328–1330, 1973.
- [Wil85] F.A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, 1985.
- [WMD06] J. Warnatz, U. Maas, and R.W. Dibble. *Combustion - Physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation, 4th edition*. Springer-Verlag, Berlin, Germany, 2006.

- [WSB97] M.J. Ward, S.F. Son, and M.Q. Brewster. Steady deflagration of HMX with simple kinetics : A new modeling paradigm. *AIAA paper 97-0590*, 1997.
- [WSB98a] M.J. Ward, S.F. Son, and M.Q. Brewster. Role of gas- and condensed-phase kinetics in burning rate control of energetic solids. *Combustion Theory Modelling*, 2 :293–312, 1998.
- [WSB98b] M.J. Ward, S.F. Son, and M.Q. Brewster. Steady deflagration of HMX with simple kinetics : A gas phase chain reaction model. *Combustion and Flame*, 114 :556–568, 1998.
- [Yan68] N. N. Yanenko. *Méthode à pas fractionnaires*. Armand Colin, 1968.

Annexe A

Description du maillage

A.1 Maillage

La géométrie du système de propulsion présente souvent une variation de section. Cette variation entraîne une modification du système unidimensionnel d'équations de départ. Considérons le cas simple des équations d'Euler monophasiques et monodimensionnelles. Pour tenir compte de la variation de section dans une tuyère, un terme non conservatif apparaît dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, qui s'écrit alors

$$\partial_t (A \rho u) + \partial_x (A (\rho u^2 + p)) = p \partial_x A \quad (\text{A.1})$$

avec $A(x)$ la section, $\rho(x, t)$ la masse volumique du fluide, $p(x, t)$ sa pression et $u(x, t)$ sa vitesse.

Pour éviter d'avoir à modifier les équations suivant la dimension du problème posé, on se place dans le cas le plus général des équations tridimensionnelles dans un maillage à trois dimensions. Les problèmes 1D et 2D seront considérés comme des cas particuliers du problème 3D en construisant un maillage adapté. C'est pourquoi nous parlerons de maillages pseudo-1D et pseudo-2D. De tels maillages nécessitent une description détaillée de conditions aux limites particulières, dont la condition d'entrée subsonique qui modélise l'arrivée de gaz chauds par les événements de l'allumeur, qui servira à allumer la charge propulsive dans la chambre. Enfin, une attention particulière sera portée au traitement de la paroi mobile.

On se place dans le repère cylindrique $(O, \vec{r}, \vec{\theta}, \vec{x})$ lié à l'axe de rotation du canon, O étant le centre de la face culasse (paroi latérale immobile de la chambre de combustion, en opposition au culot du projectile, paroi mobile au cours de la simulation). Le domaine de calcul est donc un cylindre de section et de longueur variables, schématisé par la figure 3.1.

On fait l'hypothèse d'une symétrie de révolution pour les cas 1D et 2D. Le cylindre est découpé suivant $\vec{\theta}$, avec une condition de rotation sur les faces latérales avant et arrière des maillages pseudo-1D et -2D. Le modèle unidimensionnel correspond à un découpage du cylindre uniquement suivant \vec{x} . Le cas bidimensionnel ajoute une discrétisation suivant \vec{r} .

Typiquement, un volume de notre maillage est représenté par la figure A.1. La figure A.2 illustre les différents types de maillages possibles.

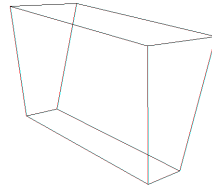


FIG. A.1 – Exemple de maille.

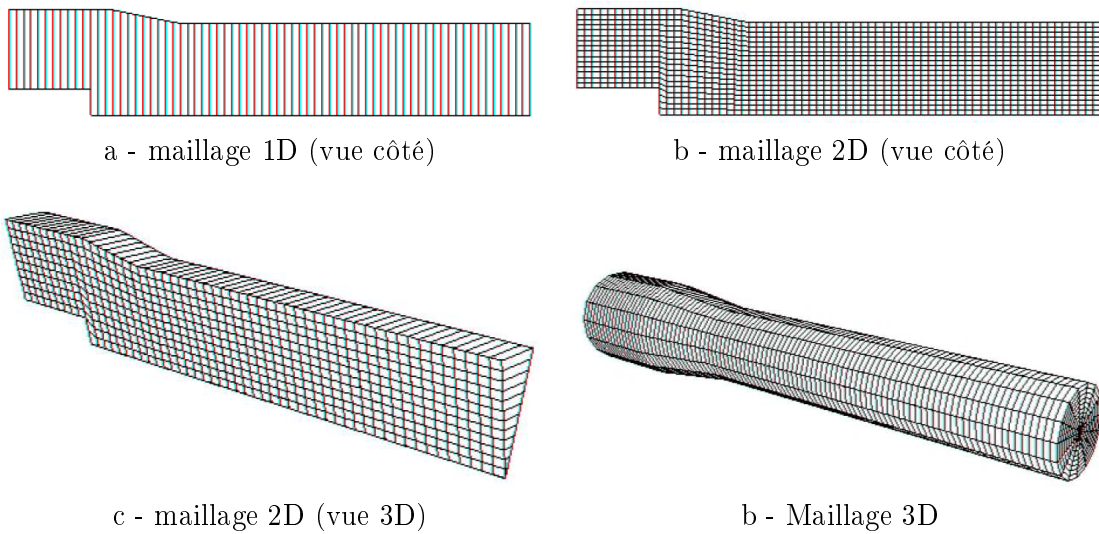


FIG. A.2 – Différents maillages suivant la dimension

Remarque 26: Toutes les surfaces sont planes.

Ainsi, en faisant uniquement varier les paramètres de discrétisation du maillage, nous sommes en mesure de résoudre des problèmes de une à trois dimensions d'espace en utilisant les mêmes équations.

A.2 Construction

On se place maintenant dans un repère cartésien $(O, \vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$. Les calculs nécessitent de connaître la géométrie exacte des mailles. On considère une maille quelconque \mathcal{V}_k de volume

V_k , composée d'un nombre $n_{f,k}$ de faces, $n_{f,k} \leq 6$, dont la surface totale est notée S_k . Soit $F_{k,j}$ la face j du k ème volume, illustrée par la figure A.3.

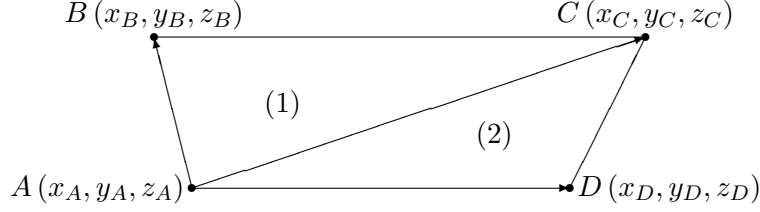


FIG. A.3 – Exemple de face

On découpe la face en deux parties (ABC) et (ACD). La surface totale de $F_{k,j}$ est donnée par

$$S_{k,j} = S_{k,j}^{(1)} + S_{k,j}^{(2)} \quad (\text{A.2})$$

avec

$$S_{k,j}^{(1)} = \frac{1}{2} \left\| \overrightarrow{AB} \wedge \overrightarrow{AC} \right\| \quad (\text{A.3})$$

$$S_{k,j}^{(2)} = \frac{1}{2} \left\| \overrightarrow{AC} \wedge \overrightarrow{AD} \right\| \quad (\text{A.4})$$

où l'exposant (1) correspond au triangle (ABC) et (2) au triangle (ACD).

Pour calculer le barycentre $G_{k,j}$ (de coordonnées $(x_{k,j}, y_{k,j}, z_{k,j})$) de la face $F_{k,j}$, on utilise les coordonnées des barycentres des deux triangles $G_{k,j}^{(1)} (x_{k,j}^{(1)}, y_{k,j}^{(1)}, z_{k,j}^{(1)})$ et $G_{k,j}^{(2)} (x_{k,j}^{(2)}, y_{k,j}^{(2)}, z_{k,j}^{(2)})$, données par la moyenne des coordonnées des trois points. Le barycentre de la face est alors donné par

$$\begin{bmatrix} x_{k,j} \\ y_{k,j} \\ z_{k,j} \end{bmatrix} = \frac{1}{S_{k,j}} \left(S_{k,j}^{(1)} \begin{bmatrix} x_{k,j}^{(1)} \\ y_{k,j}^{(1)} \\ z_{k,j}^{(1)} \end{bmatrix} + S_{k,j}^{(2)} \begin{bmatrix} x_{k,j}^{(2)} \\ y_{k,j}^{(2)} \\ z_{k,j}^{(2)} \end{bmatrix} \right) \quad (\text{A.5})$$

Le vecteur normal unitaire $\vec{n}_{k,j}$ à la face est calculé à partir du produit vectoriel normé

$$\vec{n}_{k,j} = \frac{\overrightarrow{AB} \wedge \overrightarrow{AC}}{2 S_{k,j}^{(1)}} \quad \text{ou} \quad \vec{n}_{k,j} = \frac{\overrightarrow{AC} \wedge \overrightarrow{AD}}{2 S_{k,j}^{(2)}} \quad (\text{A.6})$$

suivant l'appâtissement de la face, qui peut poser problème car la surface d'un des deux triangles peut être très petite.

Comme les faces sont planes, le volume de V_k est calculé grâce au théorème d'Ostrogradski

$$\iint_{S_k} \vec{v}(M) \cdot \vec{n}(M) dS_k = \iiint_{V_k} \nabla \cdot \vec{v}(M) dV_k \quad (\text{A.7})$$

où \vec{v} est un vecteur quelconque, M est un point de la surface de V_k , $\vec{n}(M) = \vec{n}_{k,j}$ si $M \in F_{k,j}$, dS_k est une surface élémentaire localisée en M et dV_k est un élément de volume centré sur le point M . En posant $M = G_{k,j}$ si $M \in F_{k,j}$, la géométrie des mailles permet d'écrire

$$\iint_{S_k} \vec{v}(M) \cdot \vec{n}(M) dS_k = \sum_{j=1}^{n_{f,k}} \vec{v}(G_{k,j}) \cdot \vec{n}_{k,j} S_{k,j} \quad (\text{A.8})$$

On cherche maintenant \vec{v} tel que $\nabla \cdot \vec{v} = 1$, c'est-à-dire \vec{v} de la forme $\vec{v} = [x_{k,j}, 0, 0]^T$. Ainsi, en posant $n_{k,j}^x$ la composante suivant \vec{x} de $\vec{n}_{k,j}$, le volume V_k de la maille \mathcal{V}_k est calculé par

$$V_k = \sum_{j=1}^{n_{f,k}} x_{k,j} n_{k,j}^x S_{k,j} \quad (\text{A.9})$$

Enfin la régularité de notre maillage permet de calculer les barycentres des mailles G_k en utilisant la formule de la divergence associée à une intégration numérique par point milieu où on choisit parmi plusieurs possibilités (car les faces des mailles sont planes)

$$x = \text{div} \begin{pmatrix} 0 \\ x y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad y = \text{div} \begin{pmatrix} x y \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.10})$$

ce qui donne

$$\begin{bmatrix} G_k^x \\ G_k^y \\ G_k^z \end{bmatrix} = \frac{1}{V_k} \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{n_{f,k}} G_{k,j}^x G_{k,j}^y n_{k,j}^y S_j \\ \sum_{j=1}^{n_{f,k}} G_{k,j}^x G_{k,j}^y n_{k,j}^x S_j \\ \sum_{j=1}^{n_{f,k}} G_{k,j}^x G_{k,j}^z n_{k,j}^x S_j \end{bmatrix} \quad (\text{A.11})$$

A.3 Connectivité du maillage

Le maillage étant construit, nous allons maintenant décrire la création du tableau de connectivité du maillage.

La méthode que nous avons choisie est simple, efficace et classique : plutôt que de traiter les volumes les uns après les autres et calculer les flux à chacune de leurs faces, ce qui nécessite de rechercher quelles sont les faces qui appartiennent au volume considéré ainsi que leur voisin au travers de cette face, notre algorithme boucle directement sur les faces, calcule les flux et les sommes suivant un tableau de connectivité simple.

Pour illustrer l'algorithme, on considère un maillage 2D à deux volumes (voir figure A.4).

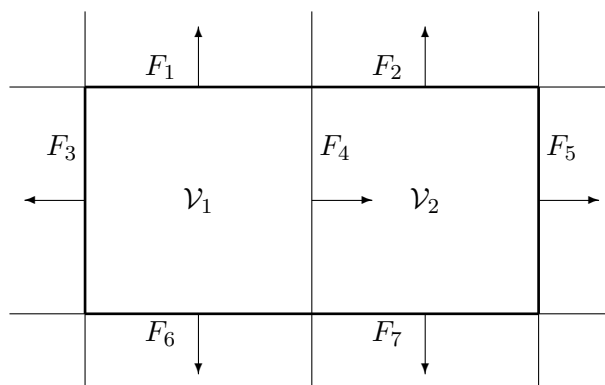


FIG. A.4 – Description de la connectivité

Les traits plus épais représentent les limites du domaine de calcul. Les faces sont numérotées de 1 à 7, les volumes 1 et 2. Les vecteurs sont les normales aux faces, orientées vers l'extérieur du domaine à la frontière. Les volumes hors du domaine sont virtuels et contiendront les états correspondant aux conditions aux limites imposées aux faces. Ces conditions aux limites seront répertoriées sous une certaine nomenclature. Pour chaque face on appelle "cellule droite" la cellule qui est pointée par la normale, la "cellule gauche" étant sa voisine.

Le principe est simple : notre tableau de connectivité sera de dimension 7×2 et contiendra les numéros des volumes de part et d'autre de chaque face. Les volumes virtuels seront notés -1. Dans notre exemple, il s'écrira

	F_1	F_2	F_3	F_4	F_5	F_6	F_7
Cellule gauche	1	2	1	1	2	1	2
Cellule droite	-1	-1	-1	2	-1	-1	-1

TAB. A.1 – Tableau de connectivité

Il est donc facile de connaître l'état gauche et droit à chaque face et d'en déduire les flux conservatifs et non conservatifs. La détermination de l'état dans les cellules fictives fait intervenir les conditions aux limites.

Annexe B

Cas tests monophasiques complémentaires

Cette annexe contient des cas tests numériques monophasiques qui viennent compléter la section 3.6.1 page 87. Trois type de tests sont présentés : tube à choc, double détente et double choc. Les solutions obtenues par la méthode directe et à pas fractionnaires sont comparées aux solutions exactes calculées à partir d'un solveur de Riemann exact. Pour toutes les simulations, la CFL est fixée à 0.7 et le pas de temps est calculé par la formule (3.29). Sauf contre-indication, le maillage utilisé est 1D et composé de 1000 cellules. Les fluides sont considérés comme des gaz parfaits avec $\gamma = 1.4$. Les états initiaux sont désignés par Y_L et Y_R où Y est la variable primitive considérée et les indices L et R correspondent respectivement à l'état initial à gauche et à droite de la discontinuité initiale, qui se situe au centre du domaine de calcul $[0; 1]$.

B.1 Tube à choc

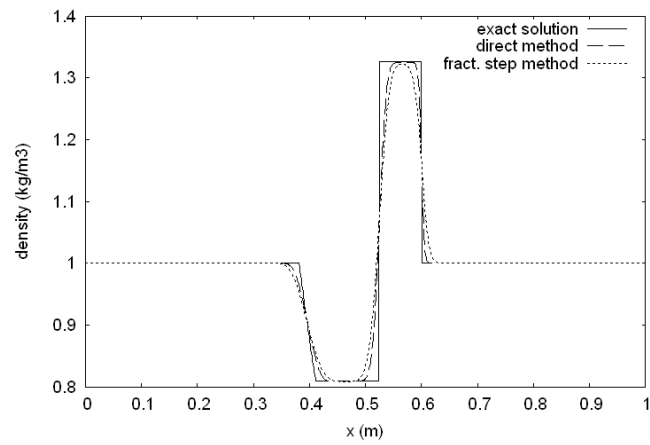
Le test du tube à choc consiste à simuler l'évolution d'un fluide initialement au repos et comportant une discontinuité de pression et/ou de densité.

Les deux premiers tests sont en régime subsonique, c'est-à-dire qu'on a toujours $M = \frac{u}{c} < 1$, où M désigne le nombre de Mach et c la vitesse du son dans le gaz dont on rappelle la formule

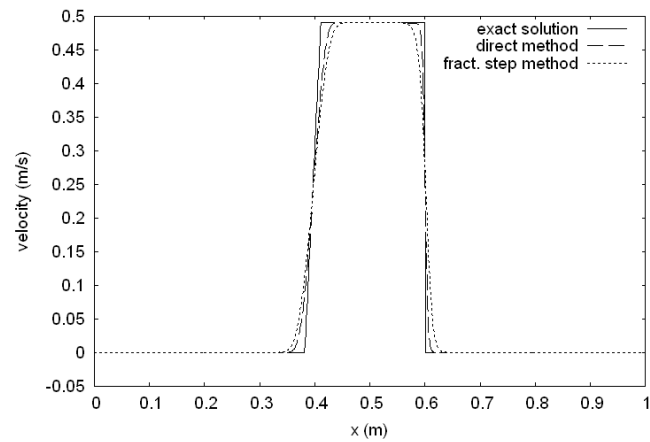
$$c^2 = \frac{\gamma p}{\rho}.$$

Pour le premier test (figure B.1), on constate que les états constants des variables sont très bien approchés. Toutes les ondes sont bien reproduites par rapport à la solution exacte. La vitesse du 3-choc est bien estimée. Les états constants initiaux sont précisément préservés aux bords du domaine, où l'écoulement n'a pas encore été perturbé. Comme observé précédemment, la méthode directe est plus précise que la méthode à pas fractionnaires.

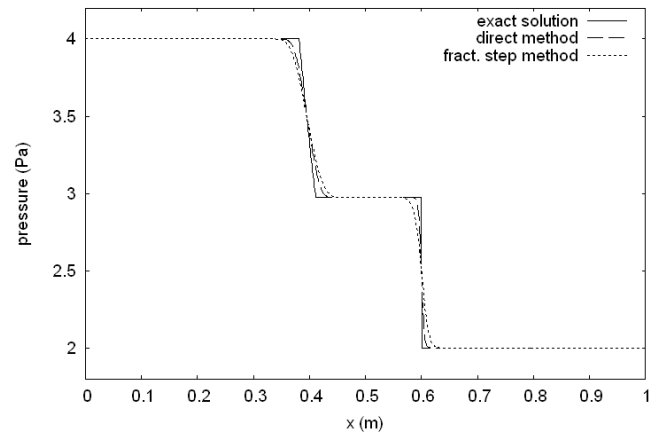
Le second tube à choc subsonique correspond à un tube à choc de Sod (figure B.2). Les mêmes remarques peuvent être faites que pour le cas test précédent.



a - densité

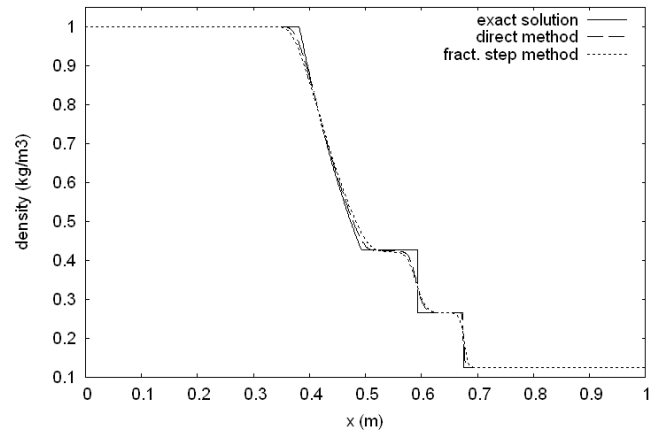


b - vitesse

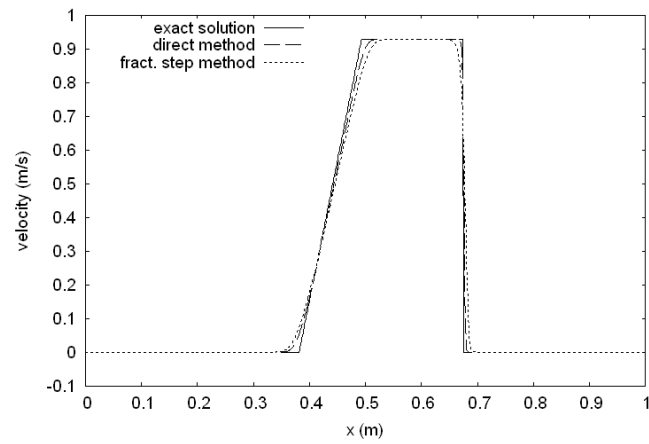


c - pression

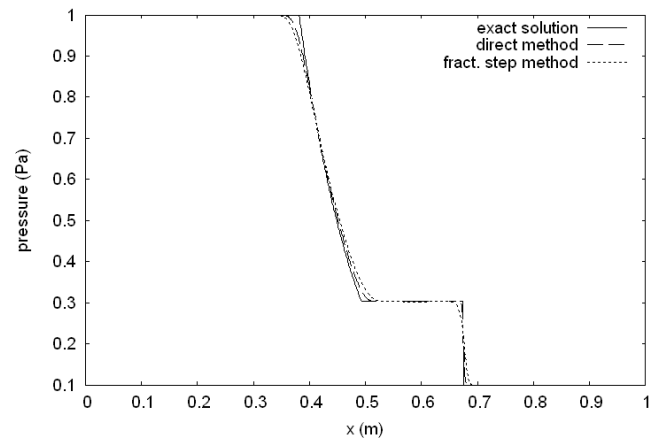
FIG. B.1 – Tube à choc : $\rho_L = \rho_R = 1 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = u_R = 0 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = 4 \text{ Pa}$, $p_R = 2 \text{ Pa}$, $t_{\text{final}} = 0.05 \text{ s}$.



a - densité



b - vitesse



c - pression

FIG. B.2 – Tube à choc Sod : $\rho_L = 1 \text{ kg.m}^{-3}$, $\rho_R = 0.125 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = u_R = 0 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = 1 \text{ Pa}$, $p_R = 0.1 \text{ Pa}$, $t_{\text{final}} = 0.1 \text{ s}$.

On observe maintenant des simulations de tube à choc supersonique ($M > 1$). La méthode directe donne des résultats en très bon accord avec la solution exacte. La méthode à pas fractionnaires fournit des résultats plus mitigés pour le maillage de 1000 cellules. Les états constants dans les zones non perturbées sont correctement préservés et toutes les ondes sont capturées. Pourtant, les états intermédiaires entre la 1-onde et la 3-onde ne sont pas très bien reproduits, en particulier au niveau du 3-choc. Le tracé de la densité et de la pression de la figure B.3 nous le prouve aisément. En raffinant le maillage à 3000 cellules (figure B.4) puis 6000 cellules (figure B.5), on constate que la solution numérique converge bien vers la solution exacte.

B.2 Double détente

On soumet maintenant le schéma numérique à la configuration de double détente symétrique qui est décrit par

$$\rho_L = \rho_R, \quad p_L = p_R, \quad u_L = -u_R < 0. \quad (\text{B.1})$$

On présente d'abord l'historique des résultats à trois instants différents (5 ms, 10 ms et 20 ms) au travers de la figure B.6 par la méthode directe. Les états intermédiaires constants sont rapidement reproduits.

La figure B.7 illustre les résultats des deux méthodes pour un maillage de 1000 mailles. Les états constants aux bords sont bien reproduits mais la forte diffusion de notre schéma numérique rend peu précis la capture des ondes de détente. Sur un maillage plus fin (4000 mailles), les résultats sont nettement meilleurs (figure B.8).

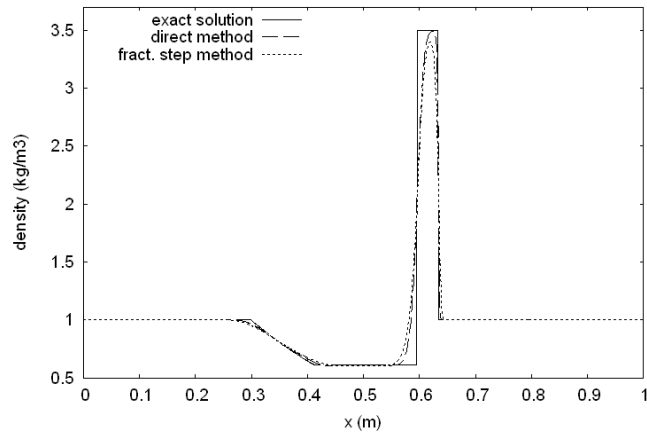
B.3 Double choc symétrique

Le cas test de double correspond à la collision entre deux jets d'un même fluide. Les conditions initiales associées sont de la forme

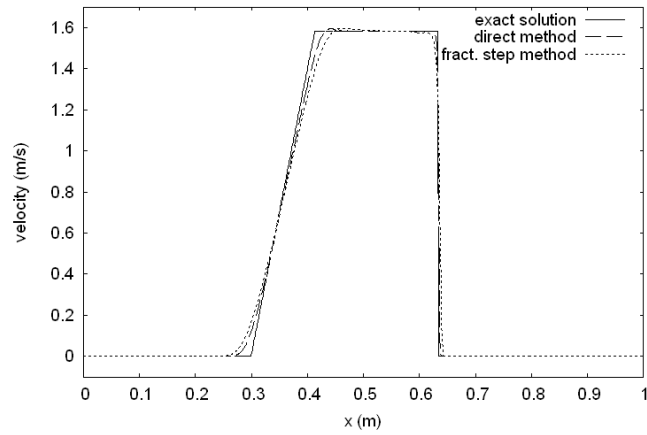
$$\rho_L = \rho_R, \quad p_L = p_R, \quad u_L = -u_R > 0. \quad (\text{B.2})$$

En fixant dans un premier temps la vitesse initiale à 10 m.s^{-1} , on obtient d'excellents résultats au niveau de la capture des chocs (figure B.9). Les états intermédiaires sont bien estimés pour la vitesse et la pression. Cependant, l'état constant intermédiaire entre les deux choc n'est pas bien reproduit sur un maillage de 1000 cellules. L'erreur diminue avec un maillage de 4000 cellules.

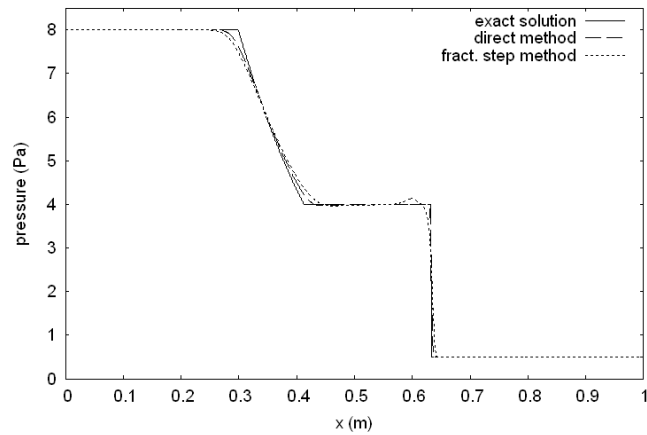
Si on augmente la vitesse du fluide (en valeur absolue) à 70 m.s^{-1} , le même phénomène est observable, comme le montre la figure B.11.



a - densité

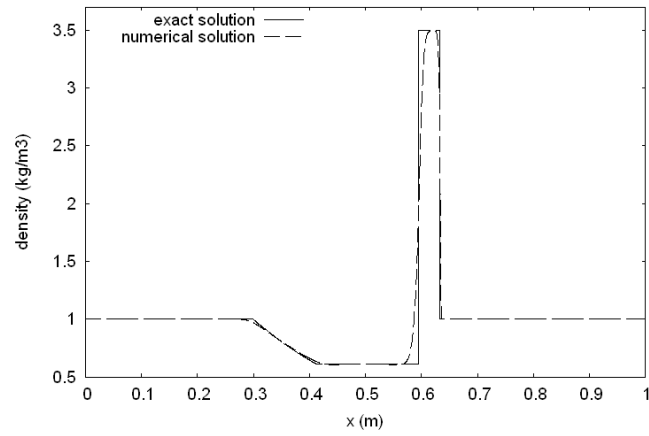


b - vitesse

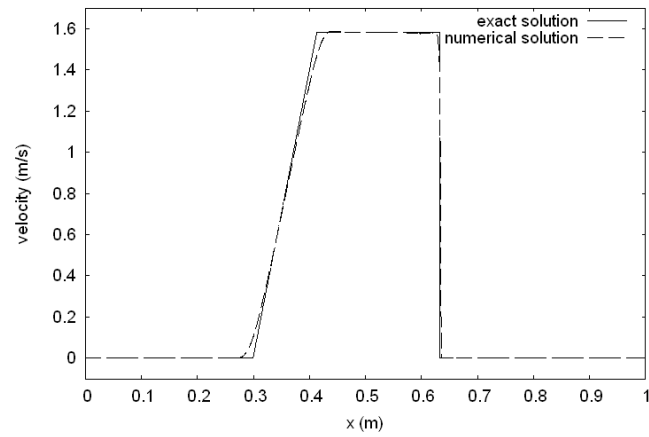


c - pression

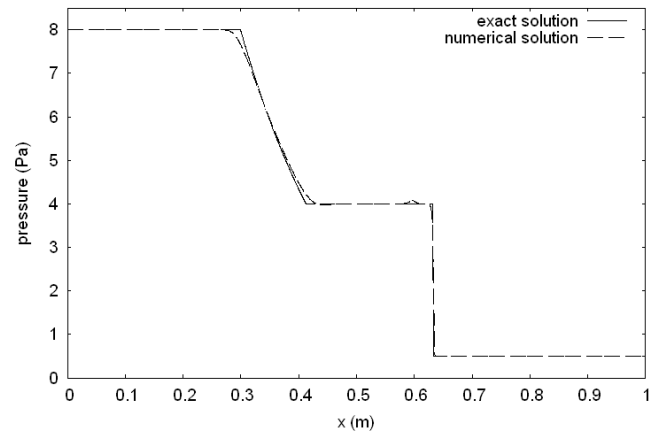
FIG. B.3 – Tube à choc : $\rho_L = \rho_R = 1 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = u_R = 0 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = 8 \text{ Pa}$, $p_R = 0.5 \text{ Pa}$, $t_{\text{final}} = 0.06 \text{ s}$.



a - densité

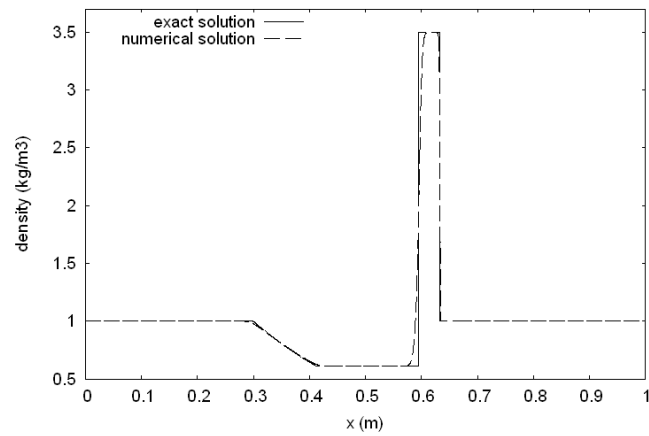


b - vitesse

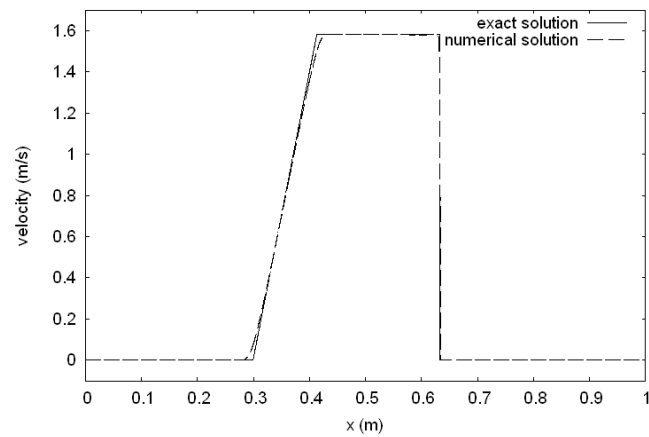


c - pression

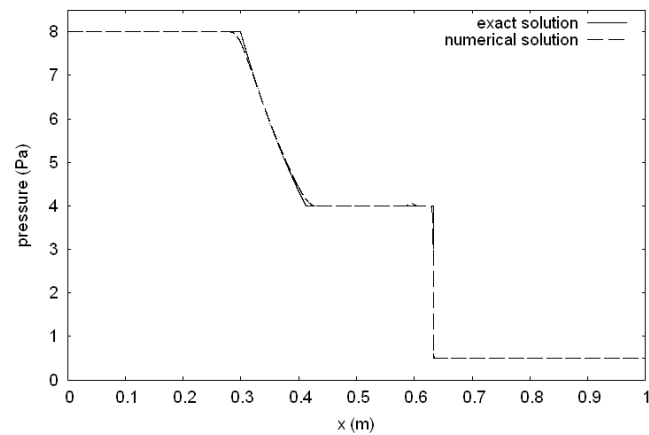
FIG. B.4 – Tube à choc : $\rho_L = \rho_R = 1 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, $u_L = u_R = 0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, $p_L = 8 \text{ Pa}$, $p_R = 0.5 \text{ Pa}$, 3000 mailles, $t_{\text{final}} = 0.06 \text{ s}$.



a - densité

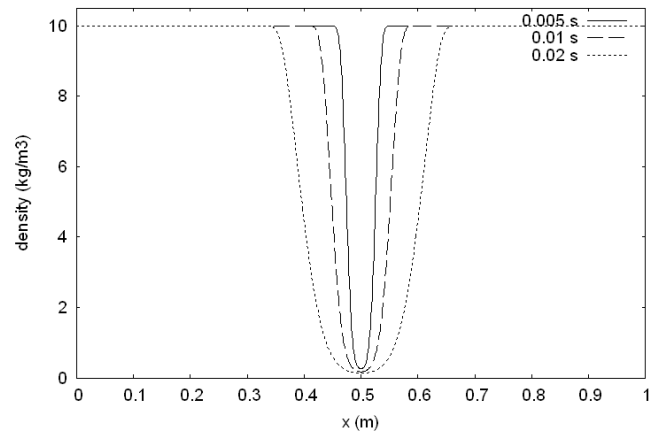


b - vitesse

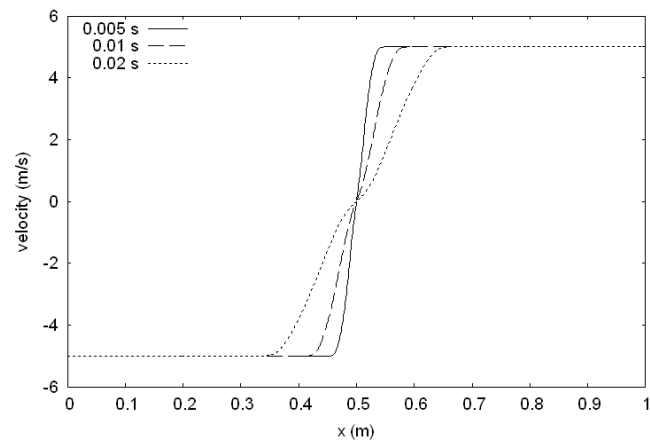


c - pression

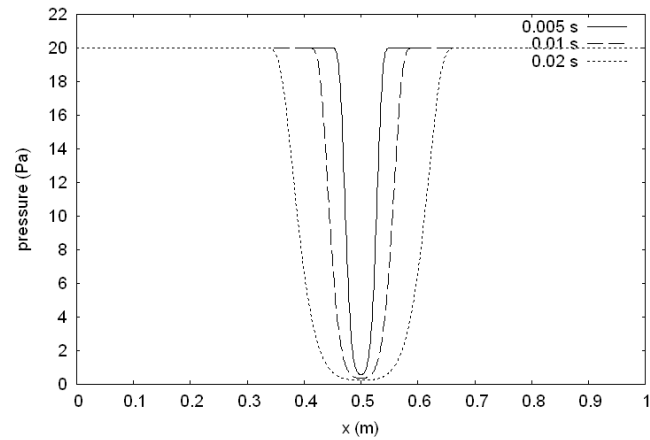
FIG. B.5 – Tube à choc : $\rho_L = \rho_R = 1 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, $u_L = u_R = 0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, $p_L = 8 \text{ Pa}$, $p_R = 0.5 \text{ Pa}$, 6000 mailles, $t_{\text{final}} = 0.06 \text{ s}$.



a - densité

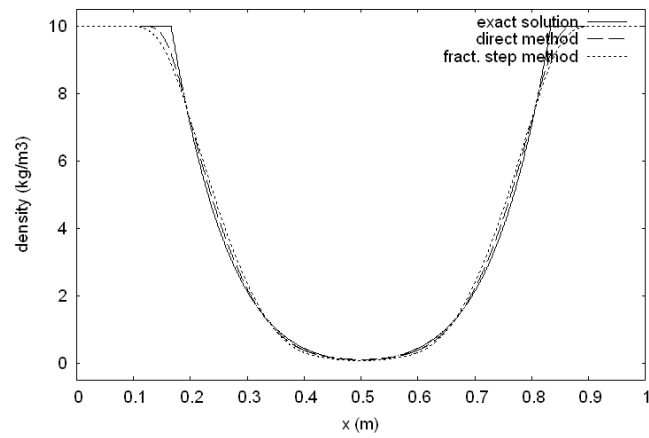


b - vitesse

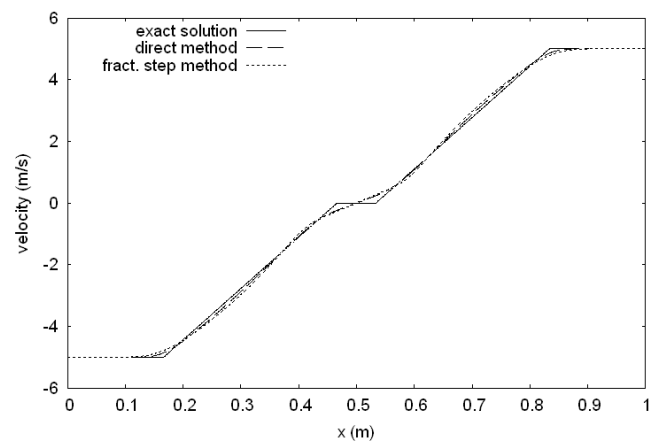


c - pression

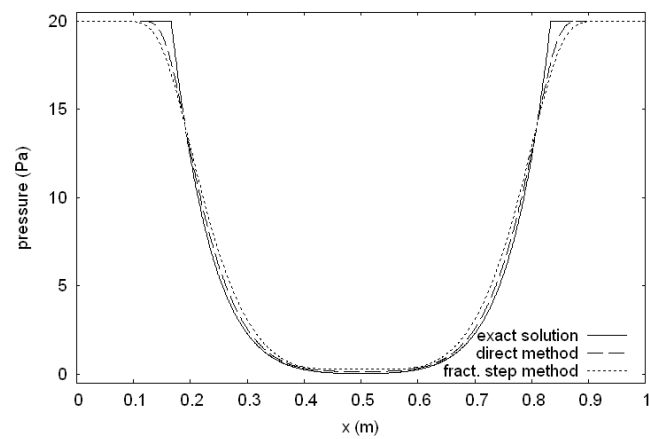
FIG. B.6 – Double détente : $\rho_L = \rho_R = 10 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, $u_L = -u_R = -5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, $p_L = p_R = 20 \text{ Pa}$.



a - densité

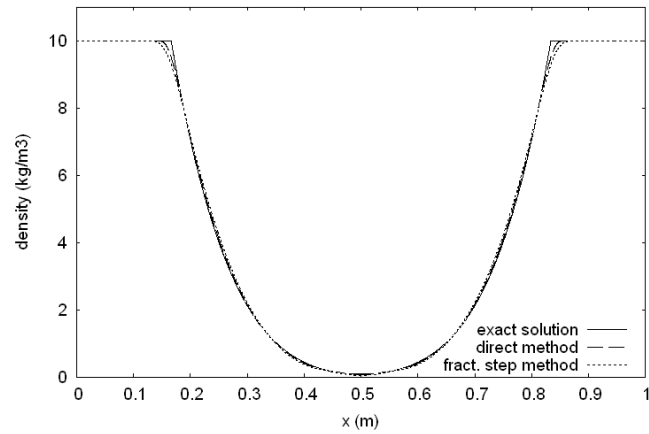


b - vitesse

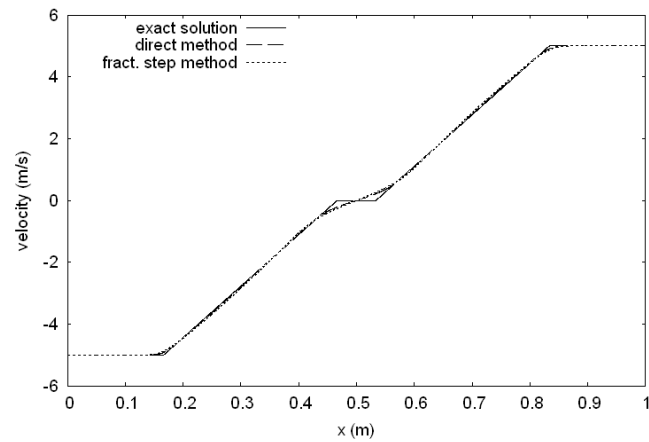


c - pression

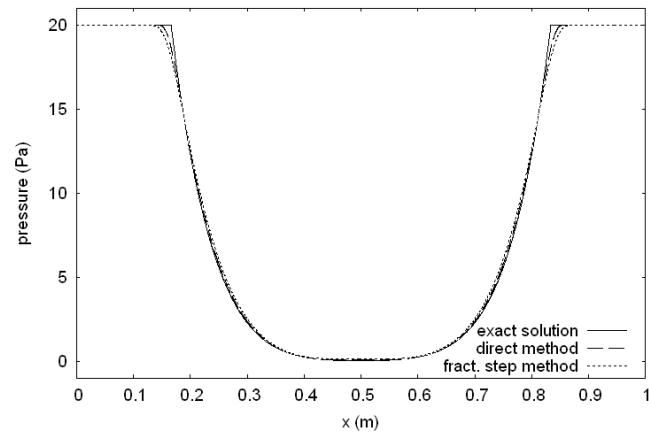
FIG. B.7 – Double détente : $\rho_L = \rho_R = 10 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = -u_R = -5 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = p_R = 20 \text{ Pa}$, $t_{\text{final}} = 0.05 \text{ s}$.



a - densité

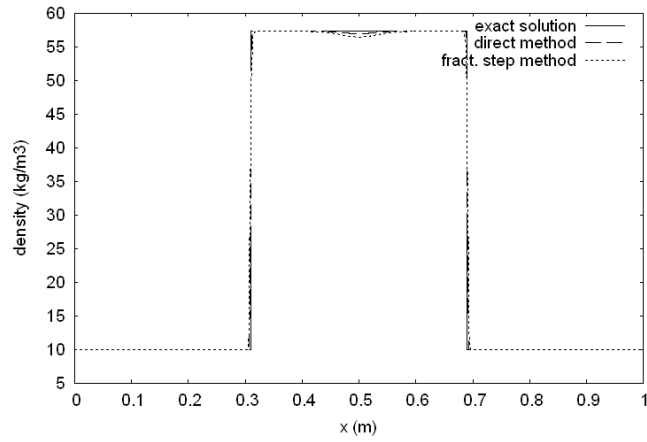


b - vitesse

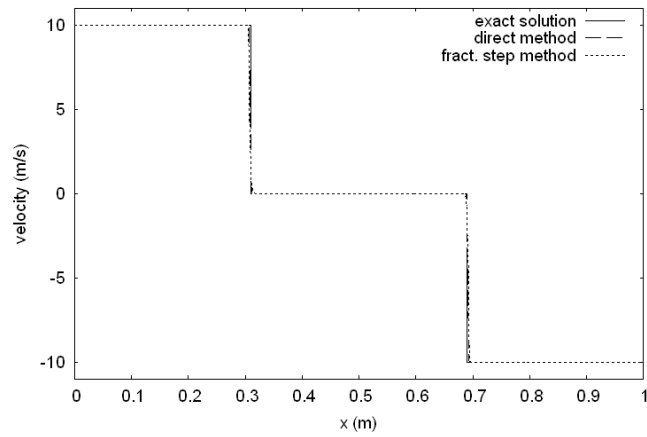


c - pression

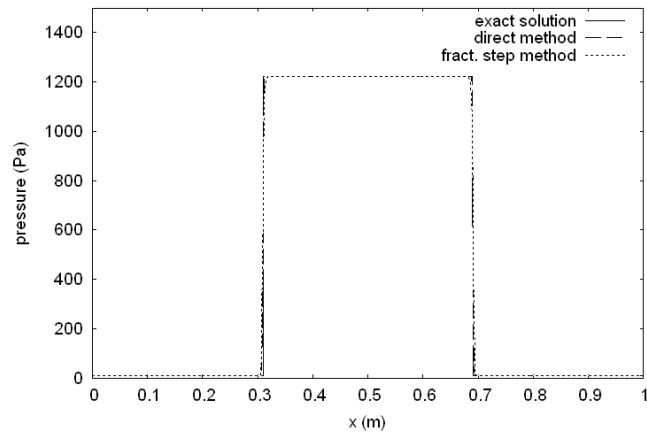
FIG. B.8 – Double détente : $\rho_L = \rho_R = 10 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = -u_R = -5 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = p_R = 20 \text{ Pa}$, 4000 mailles, $t_{\text{final}} = 0.05 \text{ s}$.



a - densité

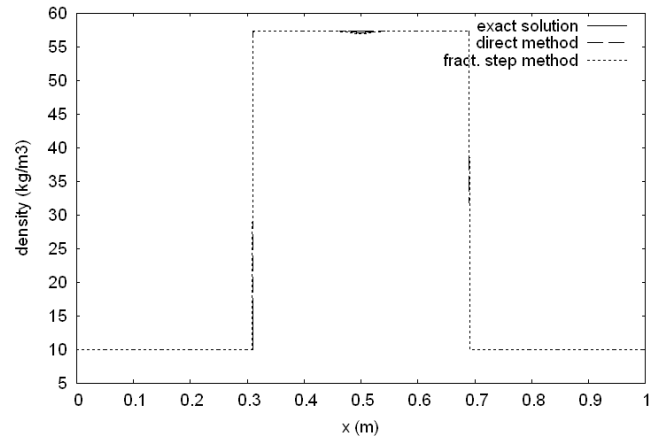


b - vitesse

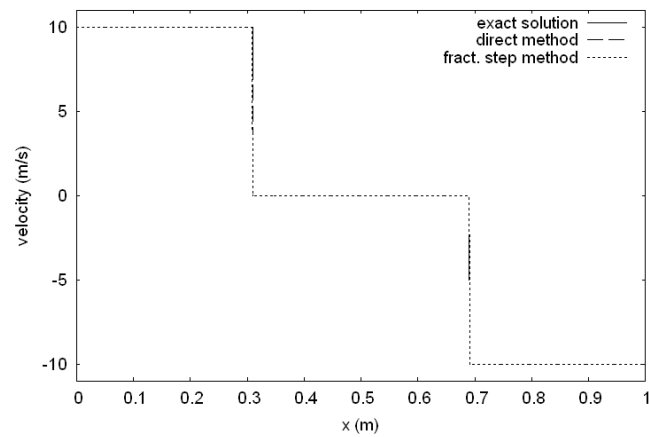


c - pression

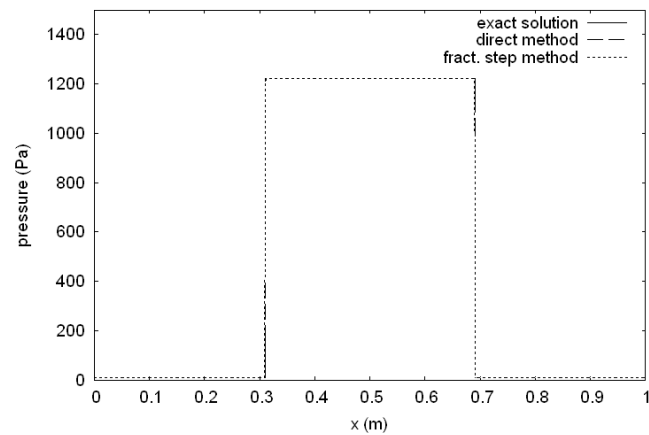
FIG. B.9 – Double choc symétrique : $\rho_L = \rho_R = 10 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = -u_R = 10 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = p_R = 10 \text{ Pa}$, $t_{\text{final}} = 0.09 \text{ s}$.



a - densité

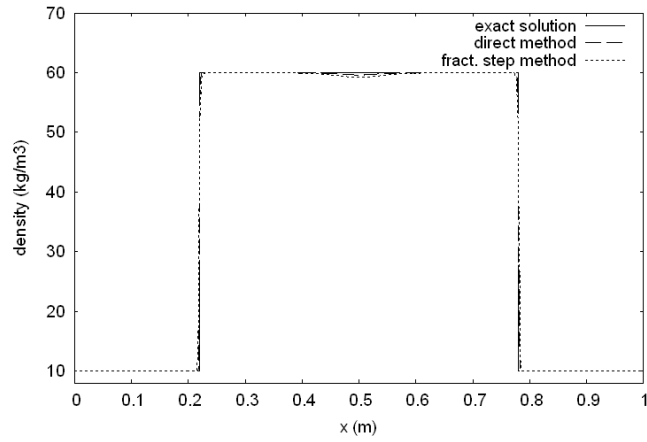


b - vitesse

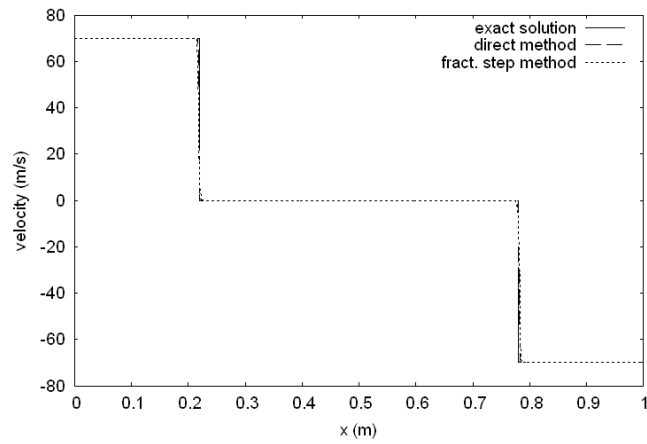


c - pression

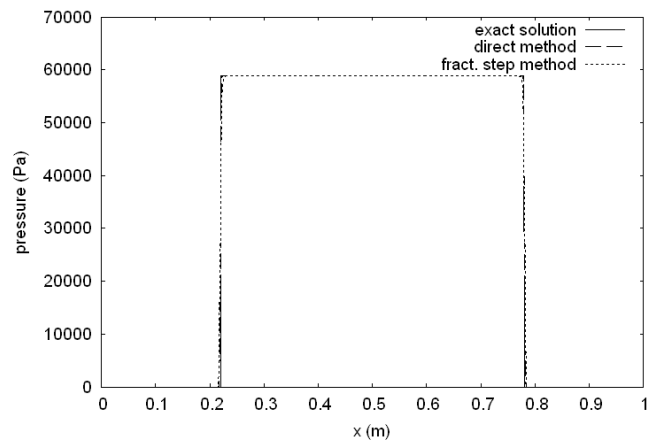
FIG. B.10 – Double choc symétrique : $\rho_L = \rho_R = 10 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = -u_R = 10 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = p_R = 10 \text{ Pa}$, 4000 mailles, $t_{\text{final}} = 0.09 \text{ s}$.



a - densité



b - vitesse



c - pression

FIG. B.11 – Double choc symétrique : $\rho_L = \rho_R = 10 \text{ kg.m}^{-3}$, $u_L = -u_R = 70 \text{ m.s}^{-1}$, $p_L = p_R = 10 \text{ Pa}$, $t_{\text{final}} = 0.02 \text{ s}$.

Annexe C

Solution analytique des équations d'Euler à section variable

Dans cette annexe, nous présentons la construction de la solution analytique du système d'Euler monodimensionnel pour des écoulements monophasiques dans une tuyère à section variable.

On pose ρ , u et p respectivement la densité, la vitesse et la pression du fluide. La variable temporelle est notée t et la variable spatiale x . On suppose que la section S de la tuyère ne dépend que de x , soit $S = S(x)$. On définit l'énergie totale E par

$$E = \rho e(p, \rho) + \frac{1}{2} \rho u^2, \quad (\text{C.1})$$

avec $e(p, \rho)$ l'énergie interne du fluide. Pour l'instant, nous considérons la thermodynamique dans le cas général sans faire d'hypothèses supplémentaires sur l'équation d'état qui relie p et e . Les équations d'Euler monophasiques à section variable s'écrivent

$$\begin{cases} (\rho S)_t + (\rho S u)_x = 0, \\ (\rho S u)_t + (\rho S u^2)_x + S p_x = 0, \\ (S E)_t + (u S (E + p))_x = 0. \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

On ne considère que les solutions régulières et on développe le système précédent qui s'écrit en variables non conservatives

$$\begin{cases} \rho_t + u \rho_x + \rho u_x = -\rho \frac{u}{S} S_x, \\ u_t + u u_x + \frac{1}{\rho} p_x = 0, \\ e_t + u e_x + \frac{p}{\rho} u_x = -u \frac{p}{\rho S} S_x. \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

202ANNEXE C. SOLUTION ANALYTIQUE DES ÉQUATIONS D'EULER À SECTION VARIABLE

On pose $\xi = x/t$ et on suppose que $\frac{t}{S(x)} S_x$ est fonction uniquement de ξ , ce qui permet d'écrire

$$\begin{cases} x = \xi t, \\ \frac{t}{S(x)} S'(x) = g(\xi), \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

soit

$$\frac{x}{S(x)} S'(x) = \xi g(\xi) = K_0, \quad (\text{C.5})$$

où K_0 est une constante (car les variables x et ξ sont indépendantes). On obtient donc

$$g(\xi) = \frac{K_0}{\xi} \quad \text{et} \quad \frac{S'(x)}{S(x)} = \frac{K_0}{x}.$$

On cherche alors des solutions soit en $(\rho(\xi), u(\xi), p(\xi))$, soit en $(s(\xi), u(\xi), p(\xi))$ où s désigne l'entropie qui vérifie

$$\gamma p \left. \frac{\partial s}{\partial p} \right|_\rho + \rho \left. \frac{\partial s}{\partial \rho} \right|_p = 0, \quad (\text{C.6})$$

et on note

$$\rho c^2 = \gamma p = \left(\frac{\partial e}{\partial p} \right)^{-1} \left[\frac{p}{\rho} - \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right) \right]. \quad (\text{C.7})$$

Comme on peut réécrire les équations (C.3) dans le système de coordonnées $(s(x, t), u(x, t), p(x, t))$

$$\begin{cases} s_t + u s_x = 0, \\ u_t + u u_x + \frac{1}{\rho} p_x = 0, \\ p_t + u p_x + \gamma p u_x = -\gamma p u \frac{S'(x)}{S(x)}, \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

le système à résoudre en variables $(s(\xi), u(\xi), p(\xi))$ s'écrit

$$\begin{bmatrix} u - \xi & 0 & 0 \\ 0 & u - \xi & 1/\rho \\ 0 & \gamma p & u - \xi \end{bmatrix} \begin{pmatrix} s'(\xi) \\ u'(\xi) \\ p'(\xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\gamma p u g(\xi) \end{pmatrix}. \quad (\text{C.9})$$

En dehors de la caractéristique $\xi = x/t = u(\xi)$, on aura alors

$$s'(\xi) = 0 \quad \Rightarrow \quad s(\xi) = s_0. \quad (\text{C.10})$$

Le système 2×2 à intégrer est donc

$$\begin{cases} (u - \xi) u' + \frac{1}{\rho(p, s_0)} p' = 0, \\ \gamma p u' + \gamma p u \frac{K_0}{\xi} + (u - \xi) p' = 0. \end{cases} \quad (\text{C.11})$$

Dans le cas d'un gaz parfait polytropique défini par

$$\rho e = \frac{p}{\gamma - 1}, \quad s = \frac{p}{\rho^\gamma}, \quad c^2 = \frac{\gamma p}{\rho},$$

on peut alors écrire l'équation à résoudre en posant $\tau = 1/\rho$

$$\gamma p \tau (p, s_0) \left(u' + \frac{K_0 u}{\xi} \right) - (u - \xi)^2 u' = 0. \quad (\text{C.12})$$

Remarque 27: Si $K_0 = 0$, c'est-à-dire que la section est constante, on trouve alors

$$u' = 0 \quad \text{ou} \quad \xi = u \pm c,$$

et donc

$$u' \pm \frac{p'}{\rho c(p, s_0)} = 0, \quad (\text{C.13})$$

ce qui nous permet de retrouver

$$u \pm \int_p \frac{dp}{\rho c(p, s_0)} = \text{cste}. \quad (\text{C.14})$$

S'il n'existe pas de solution immédiate à (C.12), on résout cette équation numériquement. Par exemple, si on pose $\gamma = 1$, l'équation à résoudre devient

$$s_0 \left(u' + \frac{K_0 u}{\xi} \right) - (u - \xi)^2 u' = 0, \quad (\text{C.15})$$

soit

$$\left(s_0 - (u - \xi)^2 \right) u' = -s_0 K_0 \frac{u}{\xi}. \quad (\text{C.16})$$

Annexe D

Données des canons 132 mm et 40 mm

Les données relatives aux canons simulés dans le chapitre 5 sont détaillées dans cette annexe. Nous rappelons brièvement la nomenclature utilisée pour désigner les éléments de la géométrie d'un canon.

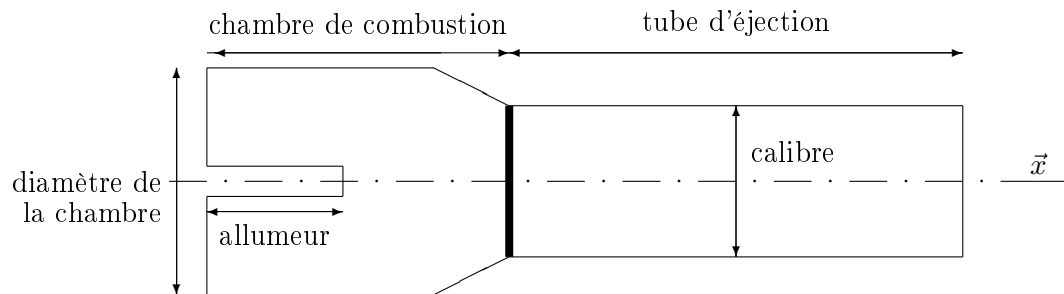


FIG. D.1 – Nomenclature de la géométrie d'un canon

D.1 Données du canon AGARD 132 mm

45.359	m_p , masse du projectile	(kg)
0.132	A , calibre (diamètre)	(m)
0.762	$x_p^{t=0}$, longueur de la chambre	(m)
5.08	$x_{p,max}$, longueur totale du canon	(m)
10^5	p_0 , pression initiale	(Pa)
294.	T_0 , température initiale	(K)
294	T_{ps_0} , température de surface initiale	(K)
$137.9 \cdot 10^5$	p_r , pression de résistance	(Pa)
21.3	M , masse moléculaire de la poudre	(kg/kmol)
$1.0838 \cdot 10^{-3}$	η , covolume	(m ³ /kg)
1.27	γ , rapport des chaleurs massiques	(-)
9.5255	m_c , masse de poudre	(kg)
1578.	ρ_2 , densité de la poudre	(kg/m ³)
892.9	Q_{ex} , chaleur d'explosion de la poudre	(kJ/kg)
1445.565	c_v , chaleur spécifique à volume constant de la poudre	(m ² /(s ² .K))
$3.12 \cdot 10^{-9}$	a_n , dans l'expression de la loi de Vieille	(m/s/Pa ⁿ)
0.9	n , dans l'expression de la loi de Vieille	(SI)
11.43	D_0 , diamètre extérieur des grains	(mm)
1.143	d_0 , diamètre de perforation des grains	(mm)
25.4	L_0 , longueur des grains	(mm)
0.4225	α_c , porosité critique	(-)
254	c_p , vitesse du son dans le lit de poudre	(m/s)
0.	ϵ_p , facteur d'émission radiatif de la poudre	(-)
$8.677 \cdot 10^{-8}$	α_p , diffusivité thermique de la poudre	(m ² /s)
0.2218	λ_p , conductivité thermique de la poudre	(J/m.s.K)
$1.5702 \cdot 10^6$	Q_{ign} , énergie dégagée par l'allumeur	(J/kg)
444	T_{ign} , température d'allumage	(K)
13132	Γ_{ign} , débit massique de l'allumeur	(kg/m ³ .s)
10	durée de fonctionnement de l'allumeur	(ms)

TAB. D.1 – Détails des données pour le canon AGARD 132mm

D.2 Données du canon 40 mm

0.790	m_p , masse du projectile	(kg)
0.042	A_{chambre} , diamètre de la chambre	(m)
0.040	A , calibre du tube (diamètre)	(m)
0.384	début de la variation de section (m)	
0.434	$x_p^{t=0}$, longueur de la chambre	(m)
3.389	$x_{p,max}$, longueur totale du canon	(m)
10^5	p_0 , pression initiale	(Pa)
294	T_0 , température initiale	(K)
294	T_{ps_0} , température de surface initiale	(K)
14	p_r , pression de résistance pour $x_p \leq 444 \text{ mm}$	(MPa)
8	p_r , pression de résistance pour $x_p > 444 \text{ mm}$	(MPa)
24.32	M , masse moléculaire de la poudre	(kg/kmol)
$1.018 \cdot 10^{-3}$	η , covolume	(m ³ /kg)
1.2303	γ , rapport des chaleurs massiques	(-)
0.440	m_c , masse de poudre	(kg)
1630	ρ_2 , densité de la poudre	(kg/m ³)
5.071	Q_{ex} , chaleur d'explosion de la poudre	(MJ/kg)
1445.565	c_v , chaleur spécifique à volume constant de la poudre	(m ² /(s ² .K))
$1.50591 \cdot 10^{-9}$	a_n , dans l'expression de la loi de Vieille	(m/s/Pa ⁿ)
0.8718	n , dans l'expression de la loi de Vieille	(SI)
3.738	D_0 , diamètre extérieur des grains	(mm)
0.945	d_0 , diamètre de perforation des grains	(mm)
0.400	L_0 , longueur des grains	(m)
0.551	α_c , porosité critique	(-)
254	c_p , vitesse du son dans le lit de poudre	(m/s)
0	ϵ_p , facteur d'émission radiatif de la poudre	(-)
$0.169 \cdot 10^{-6}$	α_p , diffusivité thermique de la poudre	(m ² /s)
0.398	λ_p , conductivité thermique de la poudre	(J/m.s.K)
$1.5702 \cdot 10^6$	Q_{ign} , énergie dégagée par l'allumeur	(J/kg)
444	T_{ign} , température d'allumage	(K)
13132	Γ_{ign} , débit massique de l'allumeur	(kg/m ³ .s)
10	durée de fonctionnement de l'allumeur	(ms)

TAB. D.2 – Détails des données pour le canon 40mm

Annexe E

Communication AIAA

Ces travaux ont fait l'objet d'une présentation orale à la 39th AIAA Thermophysics Conference de l'American Institute of Aeronautics and Astronautics qui a eu lieu à Miami (USA) du 25 au 28 juin 2007.

Numerical simulation of reactive two-phase gas-particle flows

Julien NUSSBAUM ¹, Philippe HELLUY ², Jean-Marc HÉRARD ³ et Alain CARRIÈRE¹

ABSTRACT. This work is devoted to the numerical modeling of multi-dimensional reactive gas-particle flows in a gun. We consider 2D or 3D flows in ducts of variable section. Not only complex physical phenomenons are taken into account such as interphase mass and energy transfer, but complex geometries too. Our mathematical model [Gou79] is only conditionally hyperbolic. We thus propose a fractional step method where each step is proved to be hyperbolic. The whole system is solved by a non-conservative finite volume method, adapted from [GHS04] . Validations are made on academic shock tube problems and then on several interior ballistic experiments.

E.1 Description of the problem

We consider a gun filled by a gas-particle mixture. The particles are energetic materials. The gun tube has a possible variable section, limited on the left by a wall (breach) and on

¹ISL, Saint-Louis

²IRMA, ULP Strasbourg

³EDF, Chatou

the right by a moving boundary (shot base). A perforated tube (the igniter or the primer) is located near the breech on the symmetry axis. The geometry is depicted on Figure E.1 and the different meshes are displayed on Figure E.2.

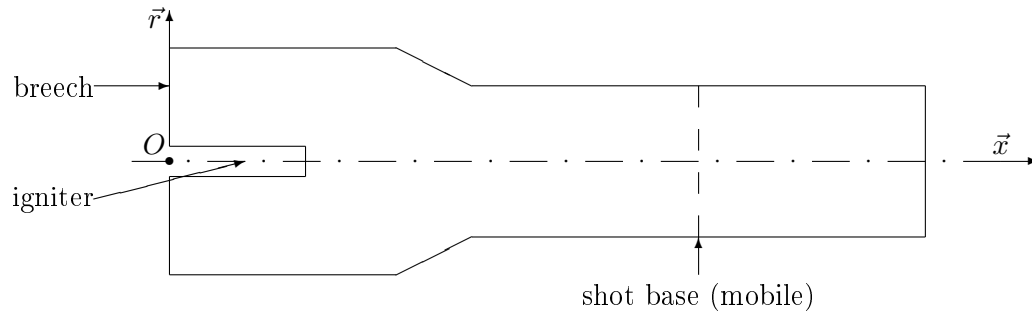


FIG. E.1 – Nomenclature of initial geometry

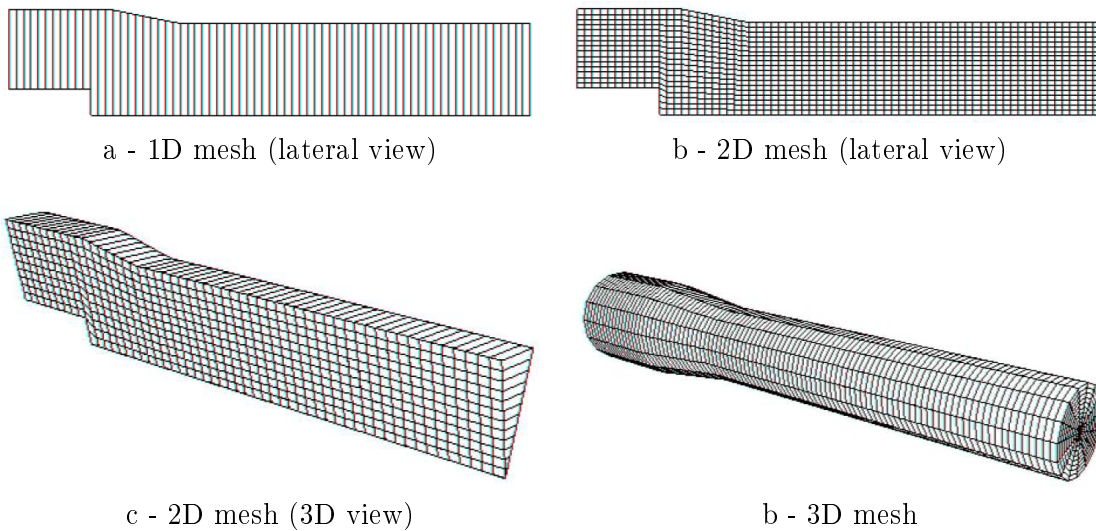


FIG. E.2 – Examples of meshes

At the initial time, a hot gas stream escapes from the holes of the igniter. The temperature of the gas-particle mixture increases due to mass, velocity and energy addition. Convective heat transfer from gas to particles surface ignites the grains, and a combustion process occurs when a sufficient energy has been absorbed by the energetic material.

The combustion leads to mass and energy transfers, therefore the pressure increases in the

combustion chamber. The combustion chamber has a constant volume, until the shot base pressure is sufficiently high to push the projectile. The simulation is performed until the shot base exits from the tube.

E.2 The mathematical model

One can find a wide range of two-phase flows models. The book of Gidaspow [Gid94] gives a good review of the different approaches. The chosen model was developed by Gough [Gou79]. It is made of seven partial differential equations, corresponding to the conservation of mass and momentum for the two phases, the conservation of energy for the gas phase and two transport equations for the enthalpy and the burnt thickness of powder.

The governing set of equations takes the general form

$$\partial_t \bar{W} + \nabla \cdot \bar{F}(\bar{W}) + \sum_{j=1}^d \bar{G}_j(\bar{W}) \cdot \frac{\partial \bar{W}}{\partial x_j} = \bar{S}(\bar{W}) \quad (\text{E.1})$$

with

$$\nabla \cdot \bar{F}(\bar{W}) = \sum_{j=1}^d \frac{\partial F_j(W)}{\partial x_j}. \quad (\text{E.2})$$

Here d is the space dimension $d = 3$. The state vector $\bar{W} = \bar{W}(\bar{x}, t) \in \Omega \subset \mathbb{R}^{11}$ is unknown. The time variable is noted $t > 0$ and the space variable $\bar{x} = (x_1, \dots, x_d) \in]0, L[\times \mathcal{C}$, where L is the length of the tube and $\mathcal{C} = \left\{ (x_1, x_2, x_3), r_{ign}^2(x_1) \leq x_2^2 + x_3^2 \leq r(x_1)^2 \right\}$ with $r(x_1)$ the radius of the variable section (depending on x_1) and $r_{ign}^2(x_1)$ is the igniter radius. The flux vectors \bar{F}_i and the sources vector \bar{S} are functions from Ω to \mathbb{R}^{11} and \bar{G}_i is a function from Ω to $\mathbb{R}^{11 \times 11}$. We define the state vector by

$$\bar{W} = (\alpha_2, \alpha_1 \rho_1, \alpha_1 \rho_1 \bar{U}_1, \alpha_2 \rho_2 \bar{U}_2, \alpha_1 E_1, H_{ts}, d)^T \quad (\text{E.3})$$

where α_k is the volumic fraction, ρ_k the density, $\bar{U}_k = (u_k, v_k, w_k)$ the velocity vectors, p_k the pressure and E_k the total energy of phase k . The index $k = 1$ corresponds to the gas phase and $k = 2$ corresponds to the solid phase. The solid phase is supposed to be incompressible. The specific enthalpy of the grains is noted H_{ts} and the thickness of the burnt powder of each grain is noted d .

The conservative fluxes are

$$\begin{aligned}
 \bar{F}_1(\bar{W}) &= \begin{pmatrix} \alpha_2 u_2 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_1 (\rho_1 u_1^2 + P_1) \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 v_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 w_1 \\ \alpha_2 (\rho_2 u_2^2 + P_2) \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 v_2 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 w_2 \\ \alpha_1 u_1 (E_1 + P_1) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{F}_2(\bar{W}) = \begin{pmatrix} \alpha_2 v_2 \\ \alpha_1 \rho_1 v_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 v_1 \\ \alpha_1 (\rho_1 v_1^2 + P_1) \\ \alpha_1 \rho_1 v_1 w_1 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 v_2 \\ \alpha_2 (\rho_2 v_2^2 + P_2) \\ \alpha_2 \rho_2 v_2 w_2 \\ \alpha_1 v_1 (E_1 + P_1) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 \bar{F}_3(\bar{W}) &= \begin{pmatrix} \alpha_2 w_2 \\ \alpha_1 \rho_1 w_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 w_1 \\ \alpha_1 \rho_1 v_1 w_1 \\ \alpha_1 (\rho_1 w_1^2 + P_1) \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 w_2 \\ \alpha_2 \rho_2 v_2 w_2 \\ \alpha_2 (\rho_2 w_2^2 + P_2) \\ \alpha_1 w_1 (E_1 + P_1) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{E.4}$$

and the non-conservative fluxes are

$$\begin{aligned}
 \overline{G}_1(\bar{W}) \frac{\partial \bar{W}}{\partial x_1} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P_1 \partial_{x_1} \alpha_2 \\ 0 \\ 0 \\ -P_1 \partial_{x_1} \alpha_2 \\ 0 \\ 0 \\ P_1 \partial_{x_1} (\alpha_2 u_2) \\ u_2 \partial_{x_1} H_{ts} \\ u_2 \partial_{x_1} d \end{pmatrix}, \quad \overline{G}_2(\bar{W}) \frac{\partial \bar{W}}{\partial x_2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ P_1 \partial_{x_2} \alpha_2 \\ 0 \\ 0 \\ -P_1 \partial_{x_2} \alpha_2 \\ 0 \\ P_1 \partial_{x_2} (\alpha_2 v_2) \\ v_2 \partial_{x_2} H_{ts} \\ v_2 \partial_{x_2} d \end{pmatrix}, \\
 \overline{G}_3(\bar{W}) \frac{\partial \bar{W}}{\partial x_3} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ P_1 \partial_{x_3} \alpha_2 \\ 0 \\ 0 \\ -P_1 \partial_{x_3} \alpha_2 \\ P_1 \partial_{x_3} (\alpha_2 w_2) \\ w_2 \partial_{x_3} H_{ts} \\ w_2 \partial_{x_3} d \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{E.5}$$

The source terms vector $\bar{S}(\bar{W})$ is detailed in [NHHC06] .

E.3 Moving mesh

The previous system is approximated by a unstructured finite volume scheme (the 1D version is described in [NHHC06] and briefly recalled below). When the pressure at the shot base is sufficiently high (greater than a resistive pressure modeling the projectile/wall friction), the right side of the computing domain moves. We propose an algorithm in order to add cells during the expansion of the mesh.

For simplicity, we describe the algorithm in the case of a 1D regular mesh. But it is easily extended to 3D because the expanding region is of constant section and thus the mesh can be locally structured in this region. We write $h^{(0)}$ the initial length of the cells. Our algorithm is the following :

- the projectile velocity v_p is computed thanks to the fundamental principle of dynamics

$$\frac{dv_p}{dt} = \frac{d^2 x_p}{dt^2} = \max \left(0, \frac{A}{m_p} (P_m - P_r) \right), \tag{E.6}$$

where x_p is the projectile position, m_p its mass, P_r and P_m respectively the resistive pressure and the shot base pressure, and A the tube section, which is constant at the shot base.

- the time step is computed with respect to the CFL number by

$$\delta t = \text{CFL} \frac{h^{(0)}}{\nu_{\max}}$$

where the maximal wave speed is defined by $\nu_{\max} = \max_{1 \leq i \leq N} (\nu_i)$. N is the number of cells, and

$$\nu_i = \|\bar{U}_{1,i}\| + c_i$$

with $\|\bar{U}_{1,i}\|$ the gas speed in the cell i ($1 \leq i \leq N$), and c_i the sound speed

$$c_i = \sqrt{\frac{\gamma P_{1,i}}{\rho_{1,i} (1 - \eta \rho_{1,i})}}. \quad (\text{E.7})$$

- we compute the new length of the shot base cells with

$$h^{(n+1)} = h^{(n)} + \delta t^{(n)} \cdot v_p^{(n)}.$$

- if $h^{(n+1)}$ is greater than twice the initial length, ie $h^{(n+1)} > 2h^{(0)}$, we change the time step by

$$\delta t^* = \frac{2h^{(0)} - h^{(n)}}{v_p^{(n)}}.$$

in order to have $h^{(n+1)} = 2h^{(0)}$, and then we split the cell into two parts and copy the state values in the two cells. We perform this algorithm until the bullet exists the tube.

E.4 Boundary conditions

At the tube surface and at the breech, we take no-slip wall conditions (mirror conditions). For the shot base case, we have a moving boundary condition with $u_1 = u_2 = v_p$.

The main difficulty comes from the primer, which is a tube perforated by a determined number of holes. Between the holes, we take wall conditions, but in order to model the hot gas stream escaping from the holes, we need to compute outlet flow condition. This is particularly delicate, because our system is not hyperbolic, and we don't have any analytical expression for the Riemann invariants.

One needs to make hypothesis in order to model igniter gas injection. We concentrate on the gas phase because only gas comes from the primer. The solid phase will agree with a wall condition. We postulate a subsonic regime, which implies that one wave goes out of the domain. We consider now a ghost cell inside the primer (left side of the boundary, subscript L : the configuration is illustrated on Figure E.3). The pressure P_L and the density ρ_L are known in the ghost cell. The radial velocity u_L is unknown but will be given by the outgoing wave. The right side (R) values correspond to a cell inside the computational domain.

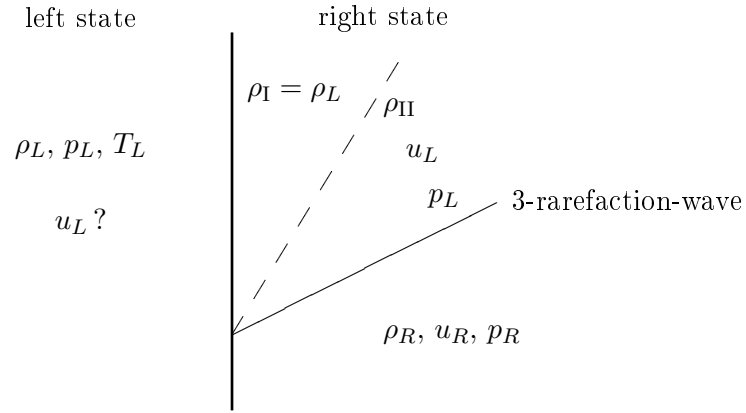


FIG. E.3 – Boundary configuration for subsonic inlet

We take the entropy equality

$$s_R = s_{II} \Leftrightarrow \frac{P_L^{1/\gamma}}{\rho_{II}} = \frac{P_R^{1/\gamma}}{\rho_R} \quad (\text{E.8})$$

and the Riemann invariant

$$u_L - \frac{2c_{II}}{\gamma-1} = u_R - \frac{2c_R}{\gamma-1} \quad (\text{E.9})$$

with (for perfect gas law)

$$c_k = \sqrt{\frac{\gamma P_k}{\rho_k}}.$$

We deduce the expression of ρ_{II} and u_L

$$\rho_{II} = \rho_R \left(\frac{P_L}{P_R} \right)^{1/\gamma}, \quad (\text{E.10})$$

$$u_L = u_R + \frac{2}{\gamma-1} (c_{II} - c_R), \quad (\text{E.11})$$

and we have

$$c_{II} = c_R \left(\frac{P_L}{P_R} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} \quad (\text{E.12})$$

and we obtain the expression of the left velocity

$$u_L = u_R + \frac{2}{\gamma-1} c_R \left(\left(\frac{P_L}{P_R} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} - 1 \right) \quad (\text{E.13})$$

We know that this expression is not strictly exact for our two-phase system, but it avoids us to compute numerically the invariants by heavy iterative methods.

E.5 Constitutive laws

The description of the complete constitutive laws set is given in [NHHC06]. We only recall the two pressure laws for the gas and the powder

– gas phase pressure P_1

$$P_1 = \frac{(\gamma - 1) \rho_1 e_1}{1 - \eta \rho_1}, \quad (\text{E.14})$$

where e_1 is the internal energy defined by

$$E_1 = \rho_1 \left(e_1 + \frac{\|\bar{U}_1\|^2}{2} \right);$$

– solid phase pressure P_2

$$P_2 = P_1 + \Lambda(\alpha_2, \rho_2).$$

The intragranular stress Λ plays a crucial role in the mathematical stability of the whole system.

E.6 Hyperbolicity of the convective part

As already discussed in [NHHC06], the convective part of the system (E.1)-(E.5) is conditionally hyperbolic. For example (see [NHHC06]), we have

1. $c_2 = 0, u_1 = u_2$: the system is hyperbolic.
2. $c_2 = 0, u_1 \neq u_2, -1 \leq \frac{u_2 - u_1}{c_1} \leq 1$: the system is not hyperbolic.
3. $c_2 < c_1, |u_2 - u_1| < \max(c_2, c_1 - c_2)$: the system is hyperbolic.

We note c_2 as an equivalent sound speed in the powder bed expressed by

$$c_2^2 = \frac{\Lambda}{\rho_2} - \frac{\alpha_2}{\rho_2} \frac{\partial \Lambda}{\partial \alpha_1}. \quad (\text{E.15})$$

Thus, at the beginning of the simulation, we are in a non hyperbolic case. In order to avoid this problem, we propose a fractional step method inspired by [CH99]. The convective system and the source terms are solved separately. The convective part is itself split into two parts, that we try to make hyperbolic. We have

– First step :

$$\partial_t \bar{W} + \nabla \cdot \bar{F}^{(1)}(\bar{W}) + \sum_{j=1}^d \bar{G}_j^{(1)}(\bar{W}) \cdot \frac{\partial \bar{W}}{\partial x_j} = \bar{0} \quad (\text{E.16})$$

– Second step :

$$\partial_t \bar{W} + \nabla \cdot \bar{F}^{(2)}(\bar{W}) + \sum_{j=1}^d \bar{G}_j^{(2)}(\bar{W}) \cdot \frac{\partial \bar{W}}{\partial x_j} = \bar{0} \quad (\text{E.17})$$

– Third step :

$$\partial_t \bar{W} = \bar{S}(\bar{W}) \quad (\text{E.18})$$

where

$$\bar{F}_i = \bar{F}_i^{(1)} + \bar{F}_i^{(2)} \quad (\text{E.19})$$

and

$$\sum_{j=1}^d \bar{G}_j(\bar{W}) \cdot \frac{\partial \bar{W}}{\partial x_j} = \sum_{j=1}^d \bar{G}_j^{(1)}(\bar{W}) \cdot \frac{\partial \bar{W}}{\partial x_j} + \sum_{j=1}^d \bar{G}_j^{(2)}(\bar{W}) \cdot \frac{\partial \bar{W}}{\partial x_j} \quad (\text{E.20})$$

E.6.1 First step

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 + \nabla \cdot (\alpha_2 \bar{U}_2) = 0 \quad (\text{E.21a})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1) = 0 \quad (\text{E.21b})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 \bar{U}_1) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \bar{U}_1 \otimes \bar{U}_1) = 0 \quad (\text{E.21c})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2 \bar{U}_2) + \nabla \cdot (\alpha_2 \rho_2 \bar{U}_2 \otimes \bar{U}_2) + \nabla (\alpha_2 \Lambda(\alpha_2)) = 0 \quad (\text{E.21d})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 E_1) + \nabla \cdot (\alpha_1 \bar{U}_1 (E_1 + P_1)) + p_1 \nabla \cdot (\alpha_2 \bar{U}_2) = 0 \quad (\text{E.21e})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_{ts} = 0 \quad (\text{E.21f})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} d = 0 \quad (\text{E.21g})$$

We study the system of the first five equations. For sake of simplicity, we consider the one-dimensional equations. We rewrite the system in the set of primitive variables $\bar{Y} = (\alpha_1, \rho_1, u_1, u_2, e_1)$ and the system takes the form

$$\bar{Y}_t + \bar{B}_1(\bar{Y}) \bar{Y}_x = \bar{0}$$

where

$$\bar{B}_1(\bar{Y}) = \begin{bmatrix} u_2 & 0 & 0 & -\alpha_2 & 0 \\ -\frac{\rho_1 u_2}{\alpha_1} & 0 & 0 & \frac{\alpha_2 \rho_1}{\alpha_1} & 0 \\ \frac{u_1^2}{\alpha_1} & \frac{u_1^2}{\rho_1} & 2u_1 & 0 & 0 \\ -\frac{c_2^2}{\alpha_2} & 0 & 0 & u_2 & 0 \\ \frac{1}{\alpha_1} \left(u_1 (e_1 - u_1^2) + \frac{P_1}{\rho_1} (u_1 - u_2) \right) & \frac{u_1}{\rho_1} \left(P_{1,\rho_1} - \frac{u_1^2}{2} + e_1 \right) & e_1 - \frac{u_1^2}{2} + \frac{P_1}{\rho_1} & \frac{\alpha_2 P_1}{\alpha_1 \rho_1} & u_1 \left(1 + \frac{P_{1,e_1}}{\rho_1} \right) \end{bmatrix}$$

The characteristic polynomial $P^{(1)}(\lambda)$ reads

$$P^{(1)}(\lambda) = \lambda(\lambda - 2u_1)(u_2 - c_2 - \lambda)(u_2 + c_2 - \lambda) \left(u_1 \left(1 + \frac{P_{1,e_1}}{\rho_1} \right) - \lambda \right) \quad (\text{E.22})$$

and thus we find the eigenvalues

$$\lambda_1 = 0 \quad \lambda_2 = 2u_1 \quad \lambda_{3,4} = u_2 \pm c_2 \quad \lambda_5 = \frac{\gamma - \eta \rho_1}{1 - \eta \rho_1} u_1 \quad (\text{E.23})$$

which are all real, so we are in an hyperbolic case.

E.6.2 Second step

We solve now the system

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 = 0 \quad (\text{E.24a})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \bar{U}_1) = 0 \quad (\text{E.24b})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 \bar{U}_1) + \alpha_1 \nabla P_1 = 0 \quad (\text{E.24c})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2 \bar{U}_2) + \alpha_2 \nabla P_1 = 0 \quad (\text{E.24d})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 E_1) = 0 \quad (\text{E.24e})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_{ts} + \bar{U}_2 \nabla H_{ts} = 0 \quad (\text{E.24f})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} d + \bar{U}_2 \nabla d = 0 \quad (\text{E.24g})$$

In the same way as the first step, the system can be written in primitive variables

$$\bar{Y}_t + \bar{B}_2(\bar{Y}) \bar{Y}_x = \bar{0}$$

where (by considering only the first five equations, the last two are transport equation)

$$\bar{B}_2(\bar{Y}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\rho_1 u_1}{\alpha_1} & u_1 & \rho_1 & 0 & 0 \\ \frac{u_1^2}{\alpha_1} & \frac{P_{1,\rho_1} - u_1^2}{\rho_1} & -u_1 & 0 & \frac{P_{1,e_1}}{\rho_1} \\ 0 & \frac{P_{1,\rho_1}}{\rho_2} & 0 & 0 & \frac{P_{1,e_1}}{\rho_2} \\ \frac{u_1}{\rho_1} \left(\frac{u_1^2}{2} - e_1 - c_1^2 \right) & \frac{u_1}{\rho_1} \left(\frac{u_1^2}{2} - e_1 - P_{1,\rho_1} \right) & \frac{u_1^2}{2} - e_1 & 0 & -\frac{P_{1,e_1}}{\rho_1} u_1 - \lambda \end{pmatrix}$$

Here we can express the characteristic polynomial $P^{(2)}(\lambda)$ as

$$P^{(2)}(\lambda) = -\lambda^3 Q(\lambda) \quad (\text{E.25})$$

with $Q(\lambda)$ a second order polynomial of the form

$$Q(\lambda) = 2\rho_1 \lambda^2 + 2P_{1,e_1} u_1 \lambda - P_{1,e_1} u_1^2 + 2P_{1,e_1} e_1 - 2\rho_1 c_1^2 \quad (\text{E.26})$$

By using the equation of state (E.14) and the sound speed expression (E.7), its determinant Δ reads

$$\Delta = 4 \left(P_{1,e_1} u_1^2 (P_{1,e_1} + 2\rho_1) + 4\rho_1 p_1 \left(\frac{\gamma - 1 + \eta \rho_1}{1 - \eta \rho_1} \right) \right) \geq 0 \quad (\text{E.27})$$

and the system associated to the second step is thus hyperbolic.

E.6.3 Third step

We solve

$$\partial_t \bar{W} = \bar{S}(\bar{W}) \quad (\text{E.28})$$

by using a simple explicit finite volume formulation that reads

$$\bar{W}_i^{n+1} = \bar{W}_i^{**} + \tau \bar{S}(\bar{W}_i^{**}) \quad (\text{E.29})$$

where \bar{W}_i^{n+1} is the final form of the state vector at the time step $n + 1$ and \bar{W}_i^{**} the state vector at the end of the second fractionnal step.

E.7 Numerical method

We use a version of the HLL scheme [HLL83], a Godunov scheme based on an approximate Riemann solver. In general, finite volume schemes are used for conservation laws. In our case, non-conservative terms induce an adaptation of the scheme. We follow the idea presented in [GHS04] for a two-fluid two-pressure model.

In order to approximate the solution, consider a space step h , a time step $\tau = \delta t$ (given above), the points $x_i = ih$ and the instants $t^n = n\tau$. The computations cells are $C_i =]x_{i-1/2}, x_{i+1/2}[$.

The solution \bar{W} at each step is approximated in each cell C_i and at each time t^n by a constant vector

$$W_i^n \simeq \bar{W}(x, t^n), \quad x \in C_i. \quad (\text{E.30})$$

The non-conservative finite volume scheme reads

$$\begin{aligned} h (W_i^{n+1} - W_i^n) + \tau \left(\mathbf{F}_{i+1/2}^n - \mathbf{F}_{i-1/2}^n \right) \\ + \tau \left(\mathbf{G}_{i+1/2,-}^n - \mathbf{G}_{i-1/2,+}^n \right) = \tau S_i^n, \end{aligned} \quad (\text{E.31})$$

where $S_i^n = \bar{S}(\bar{W}_i^n)$. We define the numerical conservative flux by the HLL flux

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^n = \begin{cases} F_i^n & \text{if } a \geq 0, \\ \frac{(bF_i^n - aF_{i+1}^n + ba(W_{i+}^n - W_i^n))}{(b-a)}, & \text{if } a < 0 < b \\ F_{i+1}^n & \text{if } b \leq 0. \end{cases} \quad (\text{E.32})$$

with

$$\begin{aligned} a &= s_{i+1/2,\min}^n, \\ b &= s_{i+1/2,\max}^n, \end{aligned}$$

and the numerical non-conservative fluxes by

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{i+1/2,-}^n &= G(W_i^n) \frac{W_{i+1}^n + W_i^n}{2}, \\ \mathbf{G}_{i-1/2,+}^n &= G(W_i^n) \frac{W_i^n + W_{i-1}^n}{2}, \end{aligned} \quad (\text{E.33})$$

The velocities $s_{i+1/2,\max}$ and $s_{i+1/2,\min}$ are respectively the maximal and minimal wave speeds at the interface $i + 1/2$. They are defined by

$$\begin{aligned} s_{i+1/2,\max}^n &= \max(s_{i,\max}^n, s_{i+1,\max}^n) , \\ s_{i,\max}^n &= \max((u_1)_i^n + c_{1,i}^n, (u_2)_i^n + c_{2,i}^n) , \\ s_{i+1/2,\min}^n &= \min(s_{i,\min}^n, s_{i+1,\min}^n) , \\ s_{i,\min}^n &= \min((u_1)_i^n - c_{1,i}^n, (u_2)_i^n - c_{2,i}^n) , \end{aligned}$$

with $c_{1,i}^n$ the gas sound speed defined by

$$c_{1,i}^n = \sqrt{\frac{\gamma P_{1,i}^n}{\rho_{1,i}^n (1 - \eta \rho_{1,i}^n)}} .$$

In practice, we only have to consider the wave speed in the gas phase : in our configuration c_1^n is always greater than the granular wave speed c_2^n and $|u_2 - u_1| \ll c_1$, so the velocities at the interface become simply

$$\begin{aligned} s_{i,\max}^n &= (u_1)_i^n + c_{1,i}^n, \\ s_{i,\min}^n &= (u_1)_i^n - c_{1,i}^n. \end{aligned} \tag{E.34}$$

E.8 Validation test cases

In this section, we present several numerical experiments. Due to the complexity of the model, many reference test cases are only 1D or 2D. Our philosophy is *always to employ the underlying 3D numerical model*, but possibly with a 1D or 2D simplified mesh. First, we compare our method to 1D and 2D solutions for compressible duct flows. The 1D solutions are described in [AW04]. They can also be recovered by an average in each section of a 2D solution. We take 1000 cells for 1D computations and a 200×100 grid for 2D computations. The red line represents the solution given by [AW04], the blue one is our 1D numerical solution and the green points are obtained from the vertical averages of a 2D solution. A_k represents the cross flow area, with $k = L$ for the left side and $k = R$ for the right side of the step. The differences between the 1D and 2D averaged solutions are due to the discontinuity of the the section. With a smooth section A they should diminish.

Then, we simulate the case of a piston driven by the expansion of high pressure gas in a confined volume. Here we consider a smooth variable cross section. We compare our results with the results given by a 1D code based on the characteristic method.

The first two-phase flow test case is the AGARD test, which has been proposed in [Rep82] and studied in [WCF⁺05] , [NHHC06] . We then simulate already studied real 40mm gun firings [WCF⁺07] .

E.8.1 First Riemann problem

The initial conditions are given in table E.1. A comparison of 1D and 2D results for density profiles is plotted in figure E.4.

Solutions are very similar. The exact solution corresponds to the form of configuration B (see

A_L	ρ_L	u_L	P_L	A_R	ρ_R	u_R	P_R
0.3	0.2	3.3	1	0.8	0.2	-4	0.07

TABLE E.1 – Initial condition

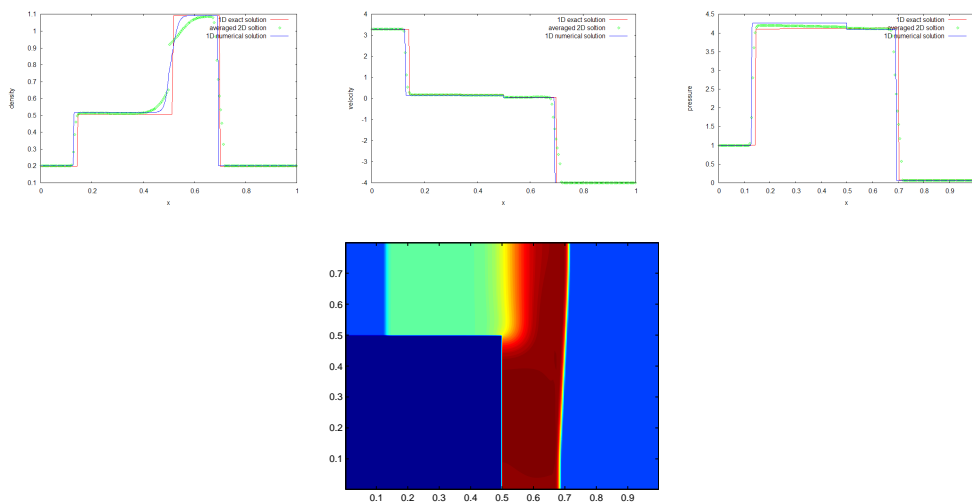


FIG. E.4 – Comparison of solutions

[AW04]).

E.8.2 Second Riemann problem

The initial conditions are given in table E.2.

A comparison of 1D and 2D results for density profiles is plotted in figure E.5. One can see

A_L	ρ_L	u_L	P_L	A_R	ρ_R	u_R	P_R
0.8	0.2069	3.0	0.2	0.3	0.1354	-3.1666	0.0833

TABLE E.2 – Initial condition

that there is a difference after the second shock between our solutions and the one proposed in [AW04]. This difference may come from the initial hypothesis: the authors of [AW04] used the classical Euler equations in a 1D duct with variable cross section. In these equations, a non-conservative term appears representing the variation of the cross section, expressed by $P \frac{\partial A}{\partial x}$. Here this term tends to infinity, because there is a discontinuity in the section. Our numerical solution, although 1D, is computed in a 2D domain, but with only one cell in the

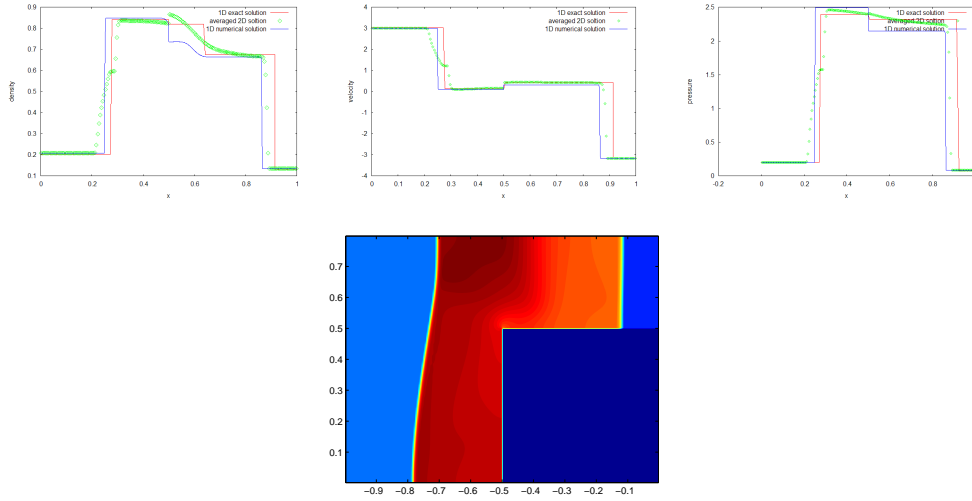


FIG. E.5 – Comparison of the solutions

y-direction. It explains why we can not have exactly the same results. The integral effects of pressure forces on the facing step are completely neglected in the 1D code, whereas the 2D mesh accounts for these.

E.8.3 Driven piston test case

We consider a cylinder of variable cross section. The right side of the volume is a piston (represented by a moving boundary condition). Figure E.6 describes the initial geometry of the system. The initial conditions of the ideal gas are $T = 293\text{ K}$, $u = 0\text{ m.s}^{-1}$ and $P = 100\text{ MPa}$, with $\gamma = 1.405$. P_r represents the resistive pressure. The total length of the tube is 3.6 m .

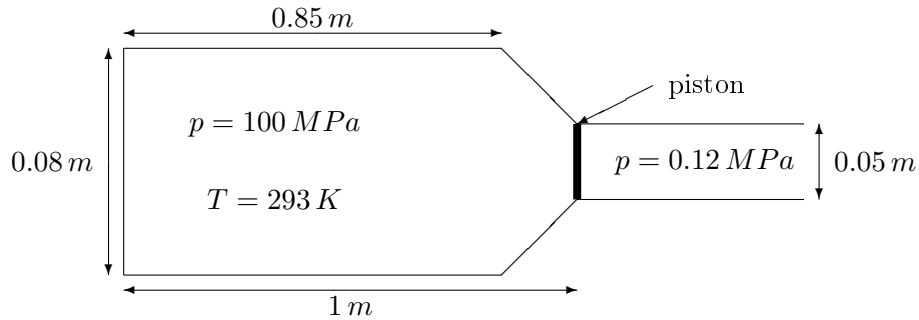


FIG. E.6 – Initial geometry

The simulation with a 1D reference software of Laumann (using the characteristics method) gives the end velocity equal to 556 m.s^{-1} , at time $t = 9.45 \cdot 10^{-3} \text{ s}$. For a 1000 cells grid, we find $u = 554 \text{ m.s}^{-1}$ and $t = 9.53 \cdot 10^{-3} \text{ s}$. Thus, the results are in a very good agreement. Figure E.7 illustrates the profiles in the entire system at the end of the simulation for the two methods.

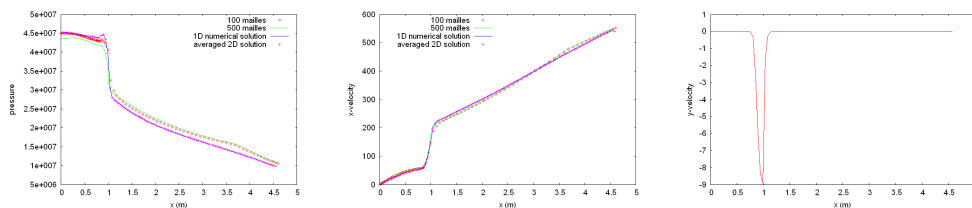


FIG. E.7 – Variable profiles

E.8.4 AGARD problem

This test case corresponds to a benchmark for internal ballistic codes. Physical data are already given in [NHHC06], and the expected results are summarized in [WCF⁺05]. Here we only consider "perfect ignition": we assume that the powder begins to burn at initial time in the entire volume of constant cross section. We have then a preview of the behavior of our code for two-phase flows.

Table E.3 compares the results synthesized in a previous work [WCF⁺05] and our results with a 1D (500×1 cells) computational domain. The direct method corresponds to the explicit scheme without the fractionnal step method. Although we can be in a non-hyperbolic case, no numerical oscillation occurs as we do not use fine grids. Some explanations have been proposed in a previous work [NHHC06]. It is interesting to compare the results for both methods, because the fractionnal step method increases the overall numerical viscosity for each time step.

Computed value	Acceptable range	Direct	Fract. Step
Maximal shot base pressure (<i>MPa</i>)	325 – 360	350	345
Maximal breech pressure (<i>MPa</i>)	355 – 400	385	379
Muzzle velocity (m.s^{-1})	660 – 705	686	670
Shot exit time (<i>ms</i>)	14.66 – 16.58	17.20	17.31

TAB. E.3 – Results for each method

The muzzle velocity is in agreement with expected values. Maximal pressures are in the expected range of values when we use a sufficiently fine discretization in the θ -direction (in a cylindrical system of coordinates). Here we have divided the cross section in 360 parts.

The shot exit time is overestimated because the initial pressure P_{ini} (taken equal to 10^5

Pa) is too low. In perfect ignition simulations, the energy added to the system from the primer is not taken into account. One can correct this approximation by taking a higher initial pressure, as shown in table E.4.

Computed value	Acceptable range	$P_{\text{ini}} = 10^5$ Pa	$P_{\text{ini}} = 10^6$ Pa
Maximal shot base pressure (<i>MPa</i>)	325 – 360	350	353
Maximal breech pressure (<i>MPa</i>)	355 – 400	385	388
Muzzle velocity ($m.s^{-1}$)	660 – 705	686	688
Shot exit time (<i>ms</i>)	14.66 – 16.58	17.20	15.47

TAB. E.4 – Influence of the initial pressure

While increasing the numerical viscosity, the fractionnal step method smooths the pressure evolution and thus the muzzle velocity becomes lower than that computed with the direct method. In order to obtain equivalent results, one needs to refine the mesh. With a 800×1 grid and then a 1100×1 grid, we obtain the numerical results summarized in the table E.5.

Computed value	500×1	800×1	1100×1
Maximal shot base pressure (<i>MPa</i>)	345	348	354
Maximal breech pressure (<i>MPa</i>)	379	382	389
Muzzle velocity ($m.s^{-1}$)	670	678	685
Shot exit time (<i>ms</i>)	17.31	17.26	17.09

TAB. E.5 – Results for refined meshes

Pressure evolutions are plotted in figure E.8 for two different meshes. As expected, the results for the two methods become equivalent because the pressure profiles become sharper with a refined mesh. No significant time delay appears between the maximal pressures.

Next, a two-dimensionnal numerical simulation is presented. We simulate the same case as the previous one on a 500×10 grid, using the fractionnal step method. We recall that the cross section remains constant. Figure E.9 illustrates the numerical results for the pressure profiles and table E.6 compares the computed values.

An unexpected phenomenon occurs : pressures become higher and are reached sooner in the two-dimensionnal simulations, though muzzle velocity is the same. No geometrical effects can explain these differences, so we suspect a numerical effect.

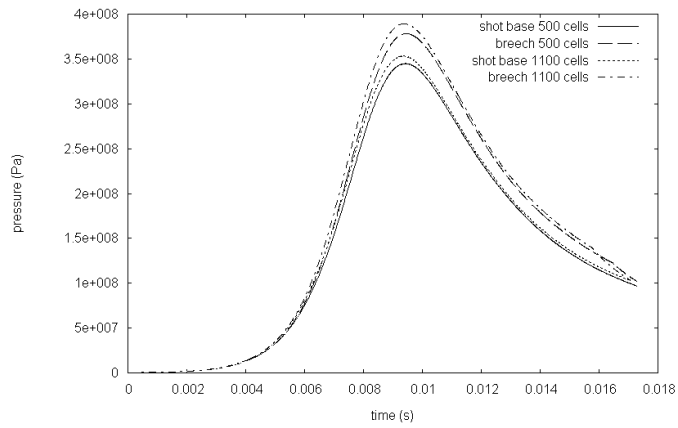


FIG. E.8 – Pressure evolutions for different meshes

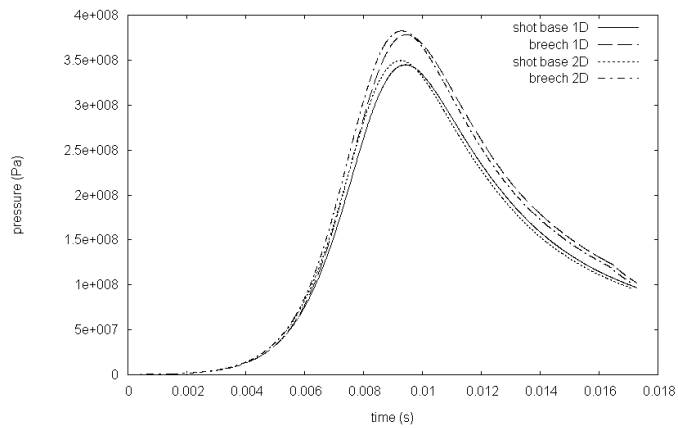


FIG. E.9 – Pressure evolutions for 1D and 2D meshes

Computed value	500×1	500×10
Maximal shot base pressure (<i>MPa</i>)	345	350
Maximal breach pressure (<i>MPa</i>)	379	383
Muzzle velocity ($m.s^{-1}$)	670	671
Shot exit time (<i>ms</i>)	17.31	17.17

TAB. E.6 – Results for 1D and 2D meshes

E.8.5 40mm gun firing

We want to compare 40mm gun firings with simulations. In this gun, the radius of the combustion chamber at the breech is 42mm and the radius of the exit tube is 40mm. Thus we have a variable cross section. The maximum pressure P_{max} that has been measured experimentally is about 420 MPa near the breech and the muzzle velocity v_f about 1230 m.s⁻¹.

As occurs in the AGARD benchmark test, simulation results from several ballistic codes have been synthesized and presented at the International Symposium of Ballistic[WCF⁺07]. All data concerning the geometry or the propellant can be found in the same reference. Important differences appeared between numerical results because each code uses different empirical submodels for simulating physical phenomena.

One-dimensionnal numerical simulations of the "perfect ignition" give the results presented in table E.7. The initial pressure is set to 10⁶ Pa and we use two different geometries :

1. without the igniter : the combustion chamber has a simplified geometry without any discontinuous cross section ;
2. with the igniter : although we are in a perfect ignition case, we take into account the more complex geometry where the cross section is discontinuous at the end of the igniter.

Computed value	without igniter	with igniter
Maximal shot base pressure (<i>MPa</i>)	303	307
Maximal breech pressure (<i>MPa</i>)	386	393
Muzzle velocity (<i>m.s⁻¹</i>)	1263	1268
Shot exit time (<i>ms</i>)	6.18	6.14

TAB. E.7 – Perfect ignition with different geometry

The computed muzzle velocity is too high and the maximal pressures are too low compared with experimental values. Since our physical submodels are the same as in the AMI code [HH86], we obtain these same problems as previously observed[WCF⁺07].

We want now to simulate an igniter. Since we do not have any specific data available about the powder in the igniter used for the firings, we choose the characteristics of the primer in order to have a realistic behaviour. We describe the gas phase by a perfect gas equation of state. The gas phase temperature is set to 2000 K and the pressure's time evolution is defined by the function

$$P(t) = \begin{cases} P_{0,ign} + t \frac{(P_{max,ign} - P_{0,ign})}{t_1} & \text{if } t < t_1, \\ P_{max,ign} & \text{if } t_1 \leq t \leq t_2, \\ P_{max,ign} + (t - t_2) \frac{(P_{0,ign} - P_{max,ign})}{t_2 - t_3} & \text{if } t_2 < t \leq t_3, \\ P_{0,ign} & \text{if } t > t_3, \end{cases} \quad (\text{E.35})$$

corresponding to figure E.10.

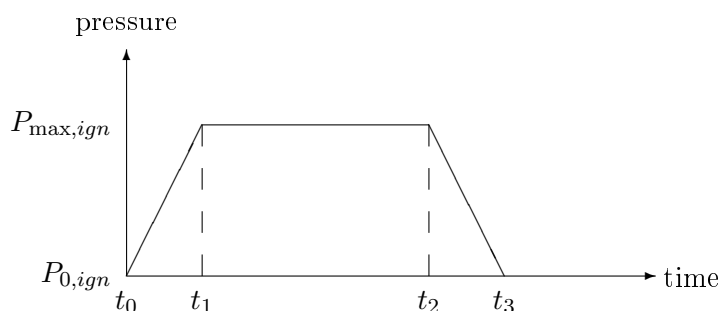


FIG. E.10 – Ideal pressure evolution in the igniter

Here we choose t_0 as the initial time, $t_1 = 0.5$ ms, $t_2 = 4$ ms and $t_3 = 4.5$ ms. The initial pressure in the igniter $P_{0,ign}$ is set to 10^5 Pa and the maximum pressure $P_{max,ign}$ to 10^8 Pa.

Our aim is to validate the boundary condition associated with the inlet flow. We use a one-dimensional 200×1 grid and then a 200×10 grid. We expect that pressure waves travel through the system because the ignition of the powder is not uniform as happens in the perfect ignition case, but the combustion propagates through the propellant bed. Some pressure gradients may occur. One main study in internal ballistic problem is to optimize the igniter to have the lower gradients as possible.

Figure E.11 illustrates the evolution of pressures at the breech and at the shot base. Unlike in the perfect ignition case, we notice that the shot base pressure may become greater than the breech pressure. This phenomenon is realistic and is the result of a travelling pressure wave which reflects on both sides of the domain. We notice that there is a good agreement between 1D and 2D numerical simulations.

E.9 Conclusions

We have presented a two-phase flow model used to simulate interior ballistic problem. The study of the convective part has shown that the model is conditionnally hyperbolic. We proposed a fractionnal step method in order to have two unconditionnally hyperbolic sub-systems. We associate a Godunov scheme based on an approximate Riemann solver and a specific treatment of the non-conservative terms of the model to solve the system of partial differential equations.

The algorithm has been validated considering several numerical test cases and a simplified single-phase driven driven test case. We can simulate reactive two-phase flows in complex

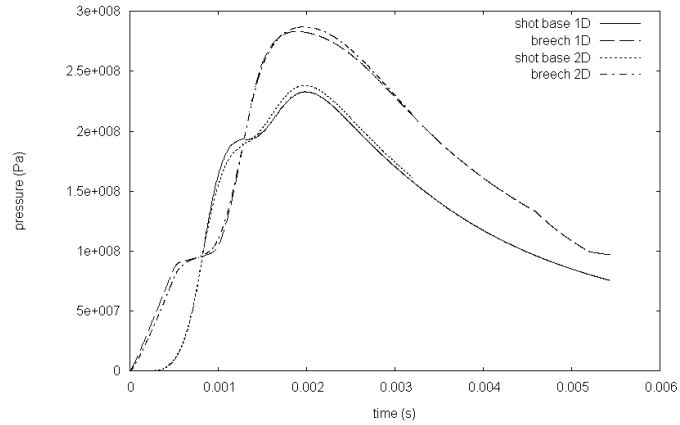


FIG. E.11 – 40mm pressure evolutions for 1D/2D simulations with igniter

multi-dimensionnal geometries and the igniter simulation is possible.

Comparison of computed values with measured values is always a difficult task because submodels describing the interactions between the gas and the powder are very basic compared with the complexity of the phenomena. Studies on the modelling of the ignition and combustion processes are in progress.

Annexe F

Communication ICDERS

Ces travaux ont fait l'objet d'une présentation poster au 21st International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems qui a eu lieu à Poitiers (France) du 23 au 27 juillet 2007.

Powder ignition modelling in interior ballistic problem

Julien NUSSBAUM¹, Patrice FRANCO¹ et Alain CARRIÈRE¹

F.1 Ignition in interior ballistic problem

Because of complex phenomena occurring, the modelling of interior ballistic flows is very difficult. The particular conditions of experiments (high pressure and temperature for example) do not give sufficient information to build rigorous models. Several correlations are used in internal ballistic codes, but they are often established in very different conditions. We focus our study on the powder ignition criteria, among the roughest approximation used in the ballistic community.

The most spread ignition criteria is summarized in two points

1. the surface temperature T_s of a grain is computed as an external heat flux is applied ;
2. when T_s reaches an empirically determined ignition temperature T_i , the grain is ignited and begins to burn (mass and energy transfer occur from the solid phase to the gas phase, burning rate following the Vieille's law [Vie93]).

¹ISL, Saint-Louis

The problem comes from the determination of T_i . It is considered as constant and measured with a "flat hot plate" method. It is well known that ignition temperature of energetic material depends on many parameters such as heat flux intensity or initial temperature. These dependencies are not taken into account by a so simple criteria.

Thus our work consists in developing a more complex model, based on physical considerations, which can reproduce some experimental phenomena. The only constraint, but not the least, is a low cost computation time. Actually, this model will be included into a new internal ballistic code (development in progress).

First we try to find an approximation of the unsteady heat equation in the solid phase, in order to simulate the heating of a grain. Then an ignition criteria developed by Lengellé [LBDA91] is adapted to our case. The last part deals with the introduction of chemical kinetic in the model, inspired by [JMB04], in order to model the combustion in a low pressure range where Vieille's law is not valid.

At this point, we present some results that show the good behaviour of the complete model. Simulations are made with conventionnal thermodynamical datas found in literature. No comparisons with experiments have been done yet, due to the difficulty to obtain kinetic parameters of powders.

F.2 Unsteady powder heating

During ignition process of propulsive charges, a powder bed is exposed to a hot gas stream, escaping from a perforated tube (called igniter) with variable temperature and velocity. Figure 1 illustrates geometry around the interface of a grain.

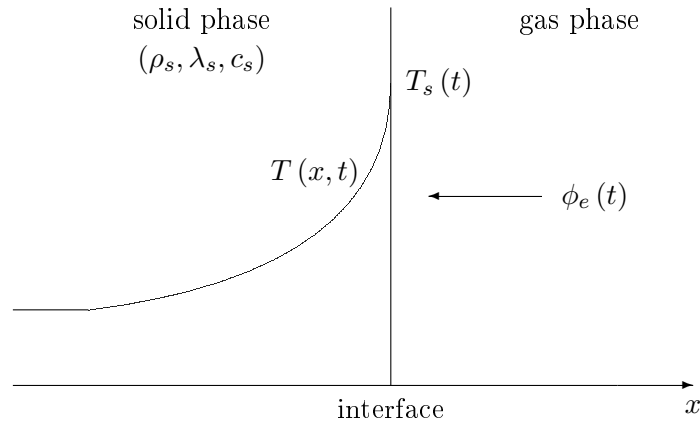


FIG. F.1 – 1D interface configuration

ρ_s , λ_s and c_s respectively define the density, thermal conductivity and the heat capacity of the solid phase, and $\phi_e(t)$ is the convective heat transfer. The gas temperature will be noted T_g , with $T_g \geq T_s$.

In order to simulate the rise of the solid temperature, we have to solve the unsteady heat equation

$$\rho_s c_s \partial_t T + \lambda_s \Delta T = 0, \quad (\text{F.1})$$

with the following initial and boundary conditions

$$T(x, 0) = T_0, \quad T(+\infty, t) = T_0, \quad T(0^+, t) = T_s(t), \quad E_{st}|_{0^+} = E_{in}|_{0^+} + E_g|_{0^+} \quad (\text{F.2})$$

where x and t are the space and time variables, T_0 is the initial temperature, E_{st} , E_{in} and E_g are respectively the stored, received and generated energy.

Some analytical solutions under some geometrical assumptions can be found [ID02], using series development, but computations are not efficient. A Finite Difference (FD) algorithm can not be used considering its heaviness although it gives good results in general cases. By building assumptions on the temperature profile (parabolic [Por88] in AMI code or cubic [Ca81] in MOBIDIC code) lead to an ODE. The loss of precision is compensated by the lightness of the method. We propose to consider an exponential profile such as

$$T(x, t) = a(t) + b(t) \exp\left(-\frac{r}{c(t)}\right) \quad (\text{F.3})$$

where a , b and c are functions of t . Only one non linear equation has to be solved (by an iterative method).

F.3 Ignition criteria

Here we consider a 0th order solid decomposition reaction [BS95] given by

$$\omega_s(x, t) = \rho_s A_s \exp\left(-\frac{E_s}{RT}\right) \quad (\text{F.4})$$

with ω_s the reaction rate, A_s the pre exponential factor, E_s the activation energy and R the perfect gas constant. We adapt the idea proposed in [LBDA91]. Ignition occurs when the energy produced by the reaction $\omega_s Q_s$ (Q_s heat of explosion) becomes non negligible compared to the energy received from the exterior. Thus, the ignition criteria can be expressed as

$$\int_0^e \rho_s Q_s A_s \exp(-E_s/RT) dx \geq \alpha \int_0^e \rho_s c_s \partial_t T dx, \quad (\text{F.5})$$

where α is a fraction of energy (usually taken equal to 0.15 for composite propellants). e is an reactive thickness computed by

$$\frac{\omega_s(e, t)}{\omega_s(0^+, t)} = \frac{1}{10}. \quad (\text{F.6})$$

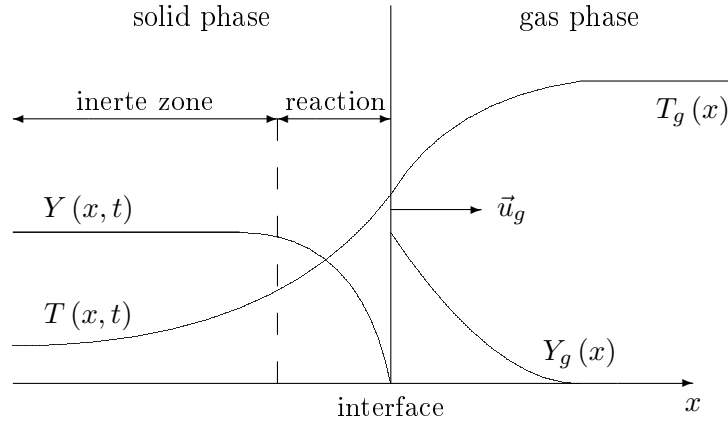


FIG. F.2 – Introduction of chemical kinetic

F.4 Introduction of chemical kinetic in the gas phase

By introducing chemical kinetic, we intend to simulate burning rate at low pressure (out of pressure application's domain of Vieille's law [Vie93]). We consider that chemical reactions in gas phase are almost steady. New configuration is illustrated in figure F.2.

Some simplifying hypothesis are made : very thin reaction zone in solid phase, only unimolecular reactions, 2nd order reaction in the gas phase ([WSB98b], [WSB98a]), Lewis number equal to 1 and thick flame model (activation energy for gas phase reaction infinitely small [BWS97], [WSB97]).

The gas temperature T_g and the reactive species volumic fraction Y_g are expressed by

$$\lambda_g \Delta T_g - \rho_g u_g c_g \frac{dT_g}{dx} + \omega_g Q_g = 0 \quad (\text{F.7})$$

$$\frac{\lambda_g}{c_g Le} \Delta Y_g - \rho_g u_g \frac{dY_g}{dx} - \omega_g = 0 \quad (\text{F.8})$$

where the reaction rate ω_g is expressed by

$$\omega_g(x) = A_g Y_g P^a \exp\left(-\frac{E_g}{RT_g}\right) \quad (\text{F.9})$$

for a reaction of order a , where we note P the gas pressure, A_g the pre exponential factor, E_g the activation energy, λ_g the thermal conductivity, c_g the specific heat, ρ_g the density, u_g the gas velocity and Le the Lewis number. Boundary conditions are given by mass balance and energy balance.

F.5 First tests

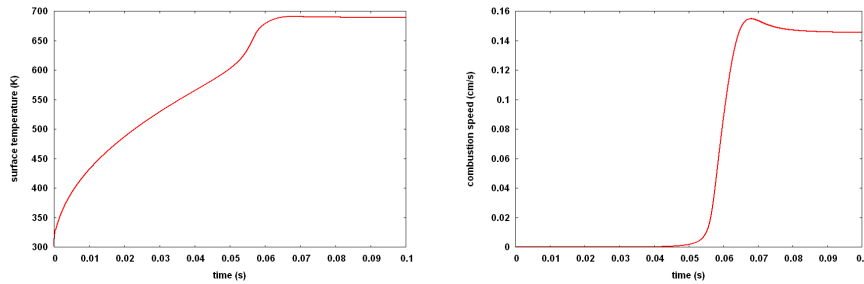
- Table F.1 summarizes simulations and experimental results [LBDA91] concerning a propellant exposed to a CO₂ laser. We find a good agreement between results. We are

aware that radiative and convective heat transfers are very different, but here we only want to show that our model reacts in a logical way : variable ignition temperatures and delay times depending on the external heat flux.

ϕ_e ($kW.m^{-2}$)	t_{ign} exp (s)	t_{ign} sim (s)	T_{ign} sim (K)
4186.8	0.0022	0.0020	591
891.8	0.034	0.033	545
456.4	0.115	0.111	528
418.7	0.132	0.129	525
184.2	0.55	0.55	505
41.9	7.6	7.8	472

TAB. F.1 – Comparison simulations/experiments

- Combustion rate and surface temperature evolution obtained by coupling the equations of both phases are displayed in figure F.3. At constant ambient conditions, stationary state appears.



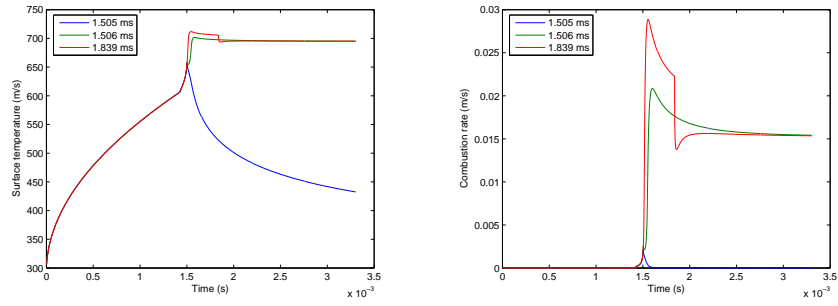
a - Surface temperature evolution b - Combustion rate evolution

FIG. F.3 – Simulations for a constant heat flux and ambient pressure

- The external heat flux is now turned off at different moments. One can see on the figure F.4 that after a certain time, even if there is no more external heating, steady combustion remains.

One can see on the figure F.4 that after a certain time, even if there is no more external heating, steady combustion remains.

- To finish, we demonstrate the compatibility of the model with the Vieille’s law. Figure F.5 shows that the steady combustion rate given by our model for low pressures (blue line) can be connected to a Vieille’s law (green straight line). Here, if we express the Vieille’s law as $r = u_g = u_s = a P^n$, we find $n = 0.89$ and $a = 1.445 \cdot 10^{-9}$. Such values are common in ballistic problems.



a - Surface temperature evolution b - Combustion rate evolution

FIG. F.4 – Simulations with extinction of the external heat flux

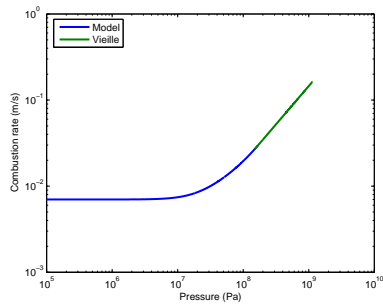


FIG. F.5 – Combustion rate in function of ambient pressure

F.6 Intermediate conclusion and perspectives

First results are very encouraging. The model react as expected when we modify parameters. Further development will be done with a more accurate description of the heat transfers. Characterization of the powders datas is in progress. Validations with experiments are planned as early as all datas are known.

Annex : datas used for simulations

ρ_s	density	$1.6 \cdot 10^6 \text{ g.m}^{-3}$
c_p	heat capacity	$1.25604 \text{ J.g}^{-1}.\text{K}^{-1}$
λ_s	thermal conductivity	$16.077 \cdot 10^{-2} \text{ J.m}^{-1}.\text{s}^{-1}.\text{K}^{-1}$
A_s	pre exponential factor	$1 \cdot 10^{17} \text{ s}^{-1}$
E_s	activation energy	$168.569 \text{ kJ.mol}^{-1}$
Q_s	chemical heat released	175.846 J.g^{-1}
λ_g	thermal conductivity	$8.37 \cdot 10^{-4} \text{ J.m}^{-1}.\text{s}^{-1}.\text{K}^{-1}$
A_g	pre exponential factor	$2.36 \cdot 10^{-5} \text{ g.m}^{-3}.\text{s}^{-1}.\text{Pa}^{-2}$
E_g	activation energy	0 kJ.mol^{-1}
Q_g	chemical heat released	2336.23 J.g^{-1}
M_g	molar mass	24 g.mol^{-1}
r_0	radius of the grain	$5.715 \cdot 10^{-3} \text{ m}$
T_0	300 K	